

UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID
ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y FLUIDOS



PROYECTO DE FIN DE CARRERA
INGENIERÍA INDUSTRIAL
**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA GASIFICACIÓN DE
CARBÓN EN UN LECHO FLUIDO BURBUJEANTE
MEDIANTE UN MODELO EULERIANO-EULERIANO DE
DOS FLUIDOS**

Autor: Miguel Ángel Caro Rodríguez

Director: Antonio Acosta Iborra

Madrid, Julio 2012

Nomenclatura

| | |
|-----------|---|
| C_p | Capacidad calorífica (J/kgK) |
| d_s | Diámetro de la partícula (m) |
| D_{gs} | Coeficiente de difusión para los gases (m ² /s) |
| g_0 | Función de distribución radial |
| h | Coeficiente de transferencia de calor por convección (W/m ² K) |
| H | Entalpía específica (J/kg) |
| j_i | Flujo de difusión (kg/m ² s) |
| k_a | Coeficiente cinético |
| k_d | Coeficiente de difusión |
| M_i | Peso molecular (kg/kmol) |
| N_u | Numero de Nusselt |
| P | Presión (Pa) |
| Pr | Numero de Prandtl |
| r | Índice de la reacción |
| R | Constante universal de los gases (J/kmolK) |
| Re | Número de Reynolds |
| S | Suma de términos másicos |
| Sc_t | Número de Schmidt |
| Sh | Número de Sherwood |
| T | Temperatura (K) |
| V_{inf} | Velocidad de entrada inferior (m/s) |
| X_j | Fracción molar |
| Y_i | Fracción másica |

Letras griegas

| | |
|---------------|---|
| α | Fracción volumétrica |
| β | Coefficiente de arrastre entre las fases sólida y gaseosa |
| γ | Término de disipación de la temperatura de partícula (W/m ³) |
| ε | Coefficiente de disipación de la energía cinética turbulenta (m ⁻² s ⁻³) |
| Θ | Temperatura granular (m/s) ² |
| k | Energía cinética turbulenta (m/s) ² |
| λ | Conductividad térmica (W/mK) |
| μ | Viscosidad (kg/ms) |
| ν | Velocidad instantánea (m/s) |
| ρ | Densidad (kg/m ³) |
| τ | Tensor de esfuerzos (Pa) |

Subíndices

| | |
|-----|-------------|
| g | Fase gas |
| s | Fase sólido |

ÍNDICE

| | |
|--|-----------|
| Resumen | 7 |
| Abstract | 8 |
| CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN | 9 |
| 1.1. Motivación del proyecto | 9 |
| 1.2. Objetivos del proyecto | 10 |
| 1.3. Metodología para la resolución del proyecto | 10 |
| 1.4. Estructura de la memoria | 11 |
| 1.5. Recursos bibliográficos | 12 |
| CAPÍTULO 2. LECHOS FLUIDOS | 13 |
| 2.1. Historia | 13 |
| 2.2. La fluidización | 14 |
| 2.3. Regímenes de fluidización | 16 |
| 2.4. Ventajas y desventajas de los lechos fluidizados | 22 |
| 2.5. Usos industriales de la fluidización | 23 |
| CAPÍTULO 3. HIDRODINÁMICA DEL LECHO FLUIDO | 29 |
| 3.1. Hidrodinámica | 29 |
| 3.1.1. Régimen de mínima fluidización | 30 |
| 3.1.2. Régimen burbujeante | 30 |
| 3.1.3. Fenómeno de Slugging | 31 |
| 3.1.4. Régimen turbulento | 32 |
| 3.1.5. Régimen de fluidificación rápida | 35 |
| CAPÍTULO 4. COMBUSTIÓN Y GASIFICACIÓN EN LECHOS FLUIDIZADOS | 37 |
| 4.1. Teoría | 37 |
| 4.2. Composición del gas obtenido | 39 |
| 4.3. Efecto de los parámetros de operación en la gasificación | 40 |

| | |
|---|-----------|
| 4.4. Efecto de las propiedades del combustible en la gasificación | 43 |
| CAPÍTULO 5. MODELO FÍSICO DEL SISTEMA DE GASIFICACIÓN UTILIZADO | 45 |
| 5.1. Modelo físico del lecho fluido | 45 |
| 5.1.1. Introducción | 45 |
| 5.1.2. Modelo físico | 45 |
| 5.1.3. Gasificador a estudio | 45 |
| 5.1.4. Consideraciones previas | 46 |
| 5.1.5. Ecuaciones de continuidad | 47 |
| 5.1.6. Ecuaciones de cantidad de movimiento | 48 |
| 5.1.7. Ecuaciones de balance de energía | 50 |
| 5.1.8. Reacciones | 51 |
| 5.1.9. Pirolisis del carbón | 51 |
| 5.1.10. Reacciones heterogéneas | 51 |
| 5.1.11. Reacciones homogéneas | 52 |
| 5.1.12. Ecuaciones de transporte para las especies | 53 |
| 5.1.13. Gastos máxicos | 54 |
| 5.2. Modelo físico de la planta de potencia | 55 |
| 5.2.1. Ciclo a estudio | 55 |
| 5.2.2. Centrales de turbina de gas, ciclo Brayton | 55 |
| CAPÍTULO 6. MODELO COMPUTACIONAL DEL SISTEMA DE GASIFICACIÓN UTILIZADO | 59 |
| 6.1. Implementación en Fluent del lecho fluidizado | 59 |
| 6.1.1. Introducción | 59 |
| 6.1.2. Características de la malla y modelo utilizado en la gasificación | 59 |
| 6.1.3. Fase sólida | 61 |
| 6.1.4. Fase gas | 62 |

| | |
|---|------------|
| 6.1.5. Reacciones homogéneas | 63 |
| 6.1.6. Interacción entre fases | 65 |
| 6.1.7. Reacciones heterogéneas | 65 |
| 6.1.8. Condiciones de contorno | 67 |
| 6.2. Implementación en CYCLEPAD del ciclo de potencia | 80 |
| CAPÍTULO 7. RESULTADOS DEL PROYECTO | 84 |
| 7.1. Introducción | 84 |
| 7.2. Simulación de la gasificación | 84 |
| 7.3. Simulaciones previas a los 3 casos estudiados | 84 |
| 7.4. Simulaciones con las reacciones desactivadas | 85 |
| 7.4.1. Entrada lateral cerrada | 85 |
| 7.4.1. Entrada lateral abierta | 87 |
| 7.5. Simulaciones las reacciones activadas | 89 |
| 7.6. Casos estudiados | 90 |
| 7.6.1. Caso I | 90 |
| 7.6.2. Caso II | 92 |
| 7.6.3. Caso III | 106 |
| 7.7. Integración en un ciclo de potencia | 118 |
| CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES | 125 |
| 8.1. Resumen principales resultados | 125 |
| 8.1.1. Caso I | 125 |
| 8.1.2. Caso II y Caso III | 126 |
| 8.1.3. Integración con el ciclo de potencia | 130 |
| 8.2. Crítica de los resultados | 131 |
| 8.3. Presupuesto | 132 |
| 8.4. Líneas futuras de trabajo | 133 |
| Bibliografía | 134 |

Resumen

El presente proyecto tiene por objetivo realizar un estudio de simulación de un gasificador de carbón en lecho fluidizado. La simulación se realiza siguiendo un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos con la intención de reflejar de la manera más fidedigna posible su comportamiento.

Los resultados de la simulación se analizarán mediante variables de interés locales y globales y se compararán con los obtenidos en experimentos. Posteriormente se integrará el gasificador en un ciclo de potencia Brayton para evaluar el rendimiento de la instalación resultante.

Finalmente el proyecto expone y resume los resultados y las conclusiones más relevantes derivadas de la simulación.

Abstract

This final project report aims to conduct a simulation of a coal bubbling fluidized bed gasifier. The simulation is conducted following a two fluid Eulerian-Eulerian model, which is intended to reflect the most realistically the fluidized bed behavior.

The simulation results are analyzed by means of local and global variables, which are also compared with reported experiments. Subsequently, the simulated gasifier is coupled to a Brayton cycle so that the overall efficiency of the resulting power plant is evaluated.

Finally, the report discusses and summarizes the most relevant results derived from the simulation.

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

1.1. Motivación del proyecto

A pesar de que existe una acuciante necesidad de encontrar nuevas fuentes de energía para satisfacer la demanda mundial, la realidad es que gran parte de la producción de energía eléctrica proviene del uso del carbón. Actualmente el 40% de la energía eléctrica consumida en el mundo se obtiene del carbón, siendo en España el origen de casi el 30 % de la energía consumida y no se prevé que en los próximos años varíen significativamente estos porcentajes.

Para la planificación del aprovisionamiento energético del futuro habrá que tener en cuenta tres factores que determinaran la mejor solución para llevarlo a cabo. Estos factores son la seguridad de abastecimiento, el problema ambiental y el precio final de la energía para los consumidores.

En la Unión Europea se está poniendo especial acento en la seguridad de abastecimiento, como se manifiesta en el Libro Verde de la Comisión europea, “Hacia una estrategia europea de seguridad del abastecimiento energético”, buscando no obstante, el respeto ambiental y un precio de la energía que permitan el crecimiento económico sostenible a nivel mundial.

He aquí la importancia del carbón como recurso energético a tener en cuenta en los próximos años, pues se trata de una fuente energética que es abundante y su abastecimiento seguro. Eso es una ventaja frente a otros hidrocarburos que son menos abundantes y se encuentran mucho más concentrados geográficamente, muchas veces en regiones inestables políticamente. Su precio es mucho más estable y previsible que el de los hidrocarburos por las razones anteriormente dadas y mucho más barato que la mayoría de las energías renovables que son actualmente rentables gracias a generosas subvenciones.

Desde el punto de vista ambiental, el carbón tiene el problema de la emisión de contaminantes que se liberan con la combustión y el bajo rendimiento que tienen la centrales convencionales que hace que aumente mucho el ratio de producción de CO₂ por cada kWh generado.

La gasificación del carbón en un lecho fluidizado es una tecnología con la que se consigue eliminar gran parte de los contaminantes del carbón como son los óxidos de azufre que producen la lluvia ácida y los óxidos de nitrógeno que producen el smog fotoquímico. Además la gasificación del carbón nos permite que el gas producido sea quemado en turbinas de gas o en centrales de ciclo combinado, cuyo rendimiento es muy superior a las centrales térmicas convencionales reduciendo con ello la emisión de CO₂ por kWh generado.

Sin embargo el enfoque tradicional de las plantas de gasificación de lecho fluidizado se ha basado en el ensayo y error de técnicas que suponían un alto coste en instalaciones y en laboratorios a escala. Por ello, actualmente se está investigando en la modelización de dichos procesos mediante programas informáticos, que permiten obtener resultados fiables a un coste considerablemente inferior.

1.2. Objetivos del proyecto

El objetivo del presente estudio es la modelización de la gasificación en un lecho fluidizado con el fin de analizar su comportamiento. Para ello, se realizará un modelo bidimensional mediante el programa Ansys Fluent V.12, que mediante unas condiciones iniciales y de contorno proporciona la composición final del gas obtenido y una visión precisa del comportamiento del gasificador a estudio.

Se analizará especialmente:

- Comportamiento hidrodinámico del lecho en función de las condiciones iniciales.
- La composición de los gases obtenidos.
- Temperatura de los gases obtenidos y del lecho.
- Cinemática de las reacciones del lecho.

Se comprobarán los resultados con los obtenidos en experimentos reportados en la literatura especializada con el fin de validar de manera práctica la simulación.

Posteriormente se integrará el gasificador en un ciclo Brayton de potencia. La turbina de gas de dicho ciclo es alimentada por los gases combustibles (syngas) del gasificador.

Para la simulación de la turbina de gas se utilizará el programa de análisis termodinámico Cyclepad, y se calculará el rendimiento de la instalación para los diferentes casos a estudio.

1.3. Metodología para la resolución del proyecto

Los pasos a seguir para la resolución del proyecto son los siguientes:

1. Se realizará un modelo del gasificador mediante el programa informático *Gambit*, de forma que pueda ser leído por el código comercial *Ansys Fluent* y mediante el cual se realizaran las simulaciones de los diferentes casos a estudio.
2. Se calcularán las condiciones iniciales de los casos simulados. Para ello se tomará como referencia el artículo:
 - Xiaofang Wang, Baosheng Jin, Wenqi Zhong “ Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification” . Chemical Engineering and Processing 48 (2009) 695-705.

Se trata de un artículo orientado a un lecho en 3 dimensiones. Como el modelo utilizado es bidimensional, se adaptarán las condiciones iniciales de forma que estas sean equivalentes y se tenga un modelo con el cual comparar los resultados.

3. Para simular las reacciones heterogéneas que se dan en el lecho entre la fase sólida y la fase gaseosa será necesario realizar un programa informático en C++ que es incorporado al código *Ansys Fluent*.
4. Se analizará el comportamiento del lecho mediante gráficas y mapas de variables instantáneas y estadísticas de interés.
5. Los gases combustibles obtenidos en la gasificación se quemarán en una turbina de gas de ciclo simple Brayton que se simulará mediante el programa Cyclepad para obtener el rendimiento de la instalación.

1.4. Estructura de la memoria.

- Capítulo 1: Sirve como introducción e indica los objetivos que se pretenden cubrir en este documento. Se aporta la motivación que ha llevado a buscar soluciones para cubrir esos objetivos. También se explica la metodología que se ha llevado a cabo para realizar el proyecto.
- Capítulo 2: Se lleva a cabo una introducción a los lechos fluidizados, los diferentes regímenes de comportamiento que se pueden dar en ellos, así como los principales usos industriales que tienen los lechos fluidizados hoy en día. Se verán cuáles son sus ventajas y cuales sus inconvenientes.
- Capítulo 3: Se profundizará en la hidrodinámica de los lechos fluidizados.
- Capítulo 4: Se estudiarán las principales reacciones que se producen en el interior del lecho y que dan lugar a la gasificación.
- Capítulo 6: Se estudiará el modelo de gasificador utilizado. La geometría, las condiciones iniciales y de contorno, los gastos máxicos utilizados así como las características del ciclo de potencia.
- Capítulo 7: Se describirá la implementación en el código Ansys Fluent del lecho fluidizado y su acople a Cyclepad para el ciclo de potencia.
- Capítulo 8: Se analizarán los resultados del proyecto mediante gráficas y mapas de variables medias e instantáneas (locales y globales) para los diferentes casos estudiados.
- Capítulo 9: Se mostrarán las conclusiones, con un breve resumen de los resultados más importantes obtenidos, se realizara una crítica de estos, y se comentaran futuras líneas de trabajo.

1.5. Recursos bibliográficos

Para realizar el presente proyecto se han utilizado libros obtenidos mediante préstamo de la biblioteca de la Universidad Carlos III de Madrid y artículos descargados de bases de datos especializadas a las que tiene acceso dicha Universidad.

También se han consultado información en abierto en internet para completar la información presentada en este proyecto.

CAPÍTULO 2. LECHOS FLUIDIZADOS

2.1 Historia

El 16 de diciembre de 1921 se abrió una nueva etapa en la historia de la energía cuando el alemán Fritz Winkler introdujo productos gaseosos a cierta temperatura por la parte inferior de una vasija que contenía partículas de carbón creando la primera demostración de gasificación de carbón en lecho fluido.

Consistía en un alimentador de carbón, que mantenía un determinado nivel en una vasija central. En esta vasija central se inyectaba aire y vapor de agua, según el gas que se quisiera obtener, logrando la fluidificación del carbón contenido en la vasija. Se suministraba calor para que pudiese llevarse a cabo la reacción y poseía además de un sistema de extracción de cenizas.

La primera aplicación industrial se llevo a cabo en los años 40 en Estados Unidos para el craqueo catalítico de los gases del petróleo. Las instalaciones utilizaban dos vasijas, en una de las cuales tenía lugar las reacciones químicas y en la otra se llevaba a cabo la regeneración del catalizador.

La primera demostración de combustión de carbón utilizando un lecho fluidizado fue perseguida y promovida por Douglas Elliott desde comienzo de los años 60 y a él se le atribuye el merito de generar vapor mediante tubos inmersos en el lecho fluido.

El uso de lechos fluidos para la obtención de energía tomó un importante impulso con la crisis del petróleo de la década de 1970, debido al aumento del precio de los hidrocarburos y la necesidad de encontrar nuevas fuentes energéticas.

Desde entonces el uso de lechos fluidizados se ha extendido a diversas industrias como la industria farmacéutica o de procesado de minerales, e incluso al desarrollo de microorganismos.

Actualmente se sigue investigando en esta tecnología llevándose a cabo experimentos sobre el comportamiento del lecho en diferentes regímenes de fluidización pero todavía no se ha llegado a una teoría unificada ya que la mayoría de estos estudios se han hecho en instalaciones a pequeña escala y no ha sido fácil extrapolar estos estudios a instalaciones de mayor tamaño debido al complejo comportamiento hidrodinámico de los lechos fluidos y a las complicadas reacciones que tienen lugar dentro del lecho.

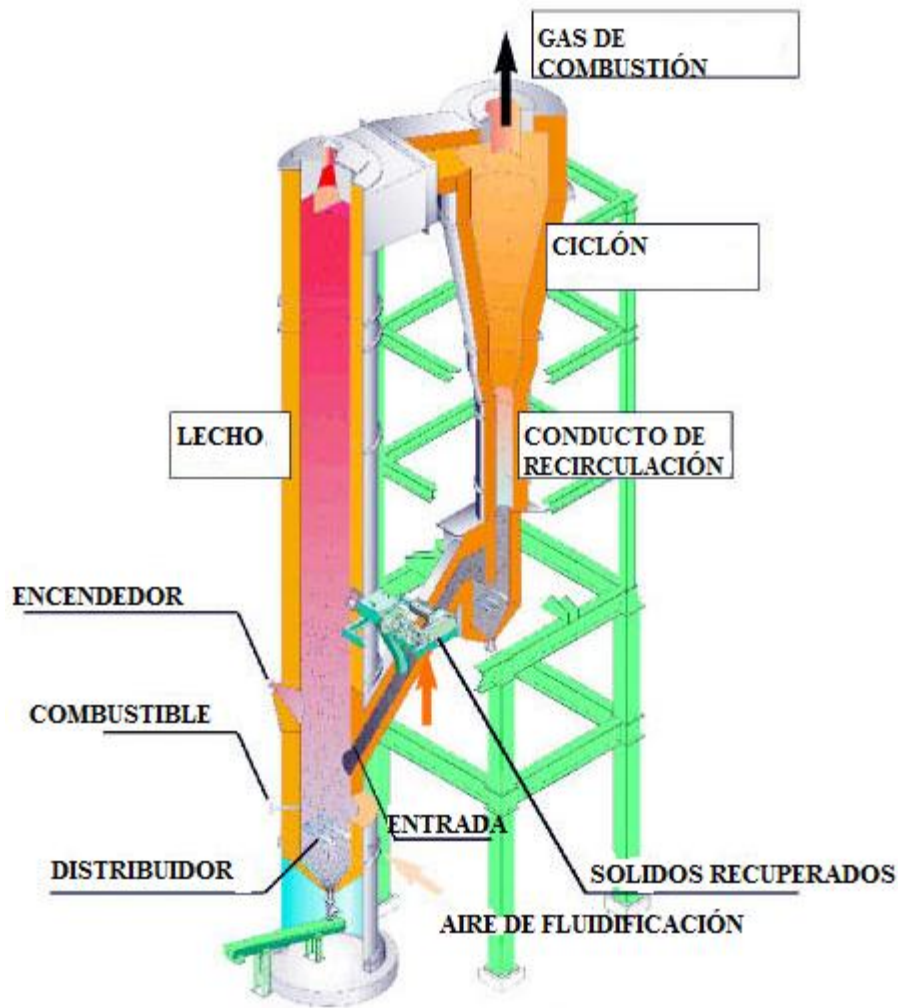


Figura 2.1. Ejemplo de un gasificador de lecho fluido con sus diferentes partes [25].

2.2 La fluidización

La fluidización es el proceso mediante el cual un conjunto de partículas sólidas adquieren propiedades similares a las de un fluido, al encontrarse suspendidas por una corriente de gas o de algún líquido.

De esta forma aparecen diferentes sistemas de funcionamiento, cada uno de los cuales con características propias que se verán más adelante. En la figura 2.1 se aprecia un modelo de gasificador basado en la fluidización con sus diferentes partes.

Las propiedades de las que goza un lecho fluido que son propias de un fluido son las siguientes:

- Flotabilidad, ya que cualquier cuerpo sumergido en el lecho fluido de menor densidad que este flotará en él, mientras que uno de mayor densidad no lo hará (figura 2.2.a).

- La capacidad de “fluir” por un agujero practicado en el recipiente que lo contiene como si fuera un líquido (figura 2.2.b).
- Mantiene su superficie horizontal a pesar de que se incline el recipiente (figura 2.2.c).
- Aparece el fenómeno de los vasos comunicantes entre lechos conectados con su superficie libre y que se encuentran a su misma presión.
- Se produce un mezclado eficaz que hace que la temperatura sea prácticamente uniforme cuando es calentado.

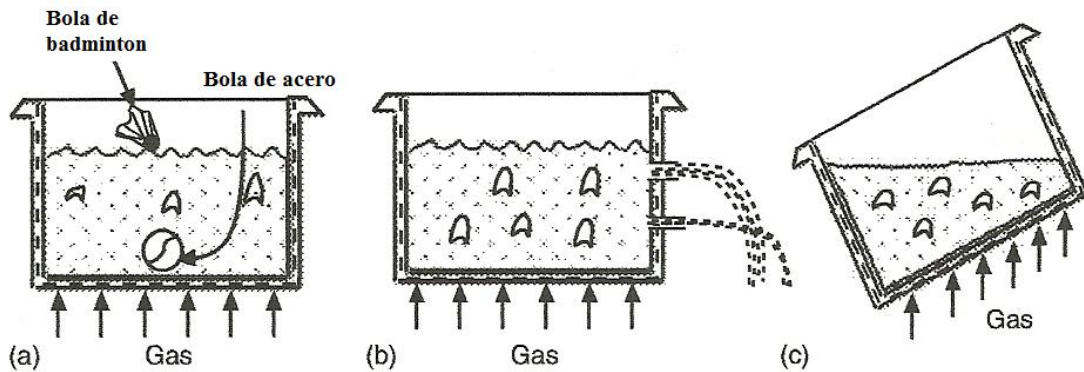


Figura 2.2. Ejemplos de lechos fluidos comportándose como un líquido [1].

Los sistemas de fluidización lo forman los siguientes elementos (figura 2.3):

- Una vasija que contiene las partículas del lecho, ya estén estas en reposo o fluidificadas.
- Un sistema encargado de la distribución del fluido para la fluidificación de las partículas. Los más utilizados son de los siguientes tipos:
 1. Distribuidores de material poroso.
 2. Distribuidores de placa agujereada, con rejilla para evitar que se introduzcan partículas del lecho por dichos agujeros.
 3. Distribuidores de tobera y caperuza, para aplicaciones en las que se inyecta el fluido a gran velocidad.

Estos sistemas deben tener buena resistencia a las altas temperaturas y a las presiones que se dan en el interior del lecho además de tener una buena resistencia a la abrasión provocada por las partículas.

- Sistemas para reponer las partículas que se puedan perder.
- En algunos sistemas se utilizan ciclones para recuperar las partículas, permitiendo que regresen de nuevo al lecho.

- Sistemas de transferencia de calor para aprovechar el calor generado.

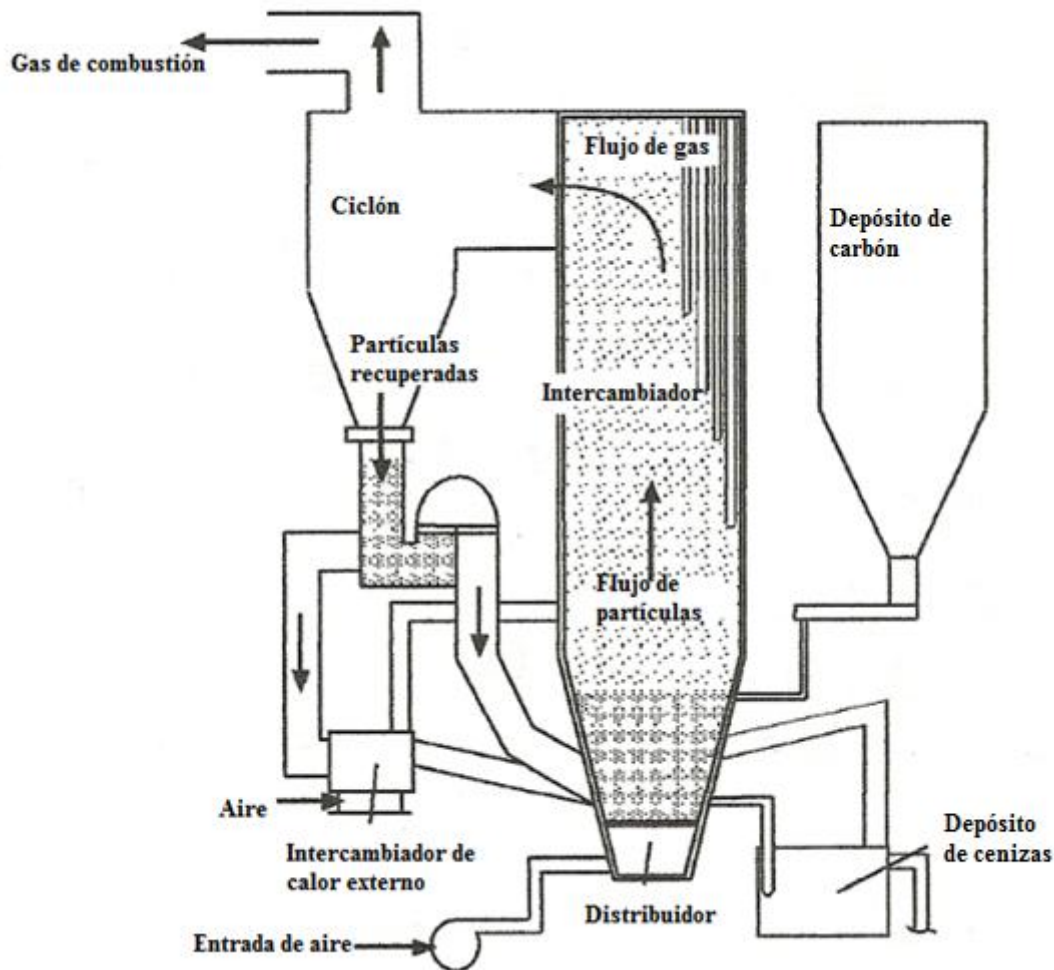


Figura 2.3. Gasificador con sistema de recuperación de partículas (Ciclón) e intercambiador de calor [1].

2.3 Regímenes de fluidización

Como se ha visto anteriormente la fluidización consiste en la suspensión de partículas mediante una corriente de gas o líquido dentro de un recipiente. El caso que se va a estudiar estará fluidizado mediante gas por lo que el comportamiento del sistema estará influido por las características de las partículas y por las propiedades del gas.

Los factores más importantes a tener en cuenta en el estudio del sistema son los siguientes:

- La densidad del gas a utilizar ya que cuando mayor sea esta mayor será la capacidad de sustentación del gas y con mayor facilidad se producirá la fluidización.
- La viscosidad del gas a utilizar ya que indica el grado de fricción que va a existir entre las partículas y el gas.

- La capacidad térmica y la conductividad calorífica del gas a utilizar ya que se van a dar fenómenos de transferencia de calor.
- La densidad de las partículas, a mayor densidad de las partículas, mayor será su peso y por lo tanto más difícil mantenerlas en suspensión.
- La porosidad de las partículas, a mayor porosidad mayor es la superficie de contacto con el gas y por lo tanto mayores serán la transferencia de calor y la fricción del gas.
- Esfericidad de las partículas debido a que el gas se comportara de una forma más desordenada a medida que disminuye la esfericidad de las partículas.
- La capacidad térmica y la conductividad térmica de las partículas, al igual que en el caso del gas, serán determinantes en los casos que exista transferencia de calor.
- Diámetro de la partícula, será determinante en la capacidad de fluidificación e influirá directamente en los regímenes que adoptara el lecho.

Las partículas del lecho se suelen clasificar siguiendo el criterio utilizado por Geldart [3] y es el siguiente:

| | Grupo A | Grupo B | Grupo C | Grupo D |
|-----------------------------|---|--|-------------------------------------|---|
| Características principales | Ideales para fluidización. Tienen un rango de no burbujeo | Comienzo del burbujeo a velocidad de mínima fluidificación | Cohesivas Dificultad para fluidizar | Tamaño elevado |
| Partículas típicas | Catalizadores de craqueo | Arena de construcción | Harina Cemento | Grava |
| Expansión del lecho | Alta | Moderada | Baja | Baja |
| Propiedades de las burbujas | Formación y coalescencia de burbujas hasta tamaño máximo | Crecimiento de burbujas hasta tamaño límite | No hay burbujas, solo canales | Crecimiento de burbujas sin tamaño límite |
| Mezcla de partículas | Alta | Moderada | Muy baja | Baja |
| Mezcla de gas | Alta | Moderada | Muy baja | Baja |

Tabla 2.1. Propiedades de las partículas según su grupo de Geldart [3].

1. Grupo A: partículas entre 30 y 100 μm , o de densidad inferior a 1,4 g/cm^3 .

La expansión que sufren los lechos formados por estas partículas es alta antes de aparecer el régimen burbujeante, necesitando velocidades mayores que otros tipos de partículas para que comience el lecho a burbujear además de mantener su régimen de mínima fluidificación en un mayor rango de velocidades. La causa de este comportamiento es la elevada porosidad debida al pequeño tamaño de sus partículas.

2. Grupo B: partículas entre 40 y 500 μm y densidad entre los 4 g/cm^3 y 1,4 g/cm^3 .

Este tipo de partículas presenta régimen burbujeante en cuanto comienza su fluidización a diferencia de las partículas de tipo A. Por lo tanto la velocidad de mínima fluidificación coincide con la de comienzo de régimen burbujeante.

3. Grupo C: partículas de tamaño muy pequeño, menores de $30\mu\text{m}$. Al ser tan pequeñas tienen tendencia a formar conglomerados por lo que es necesario introducir partículas de mayor tamaño entre ellas para favorecer la fluidización del lecho.
4. Grupo D: partículas de gran tamaño, mayores de $500\mu\text{m}$ con dificultad para ser fluidizadas, pero una vez que comienza la fluidización aparece un régimen burbujeante al igual que ocurría con las partículas de tipo B.

En la figura 2.4 se aprecia la relación entre la densidad y el diámetro para los diferentes grupos de partículas.

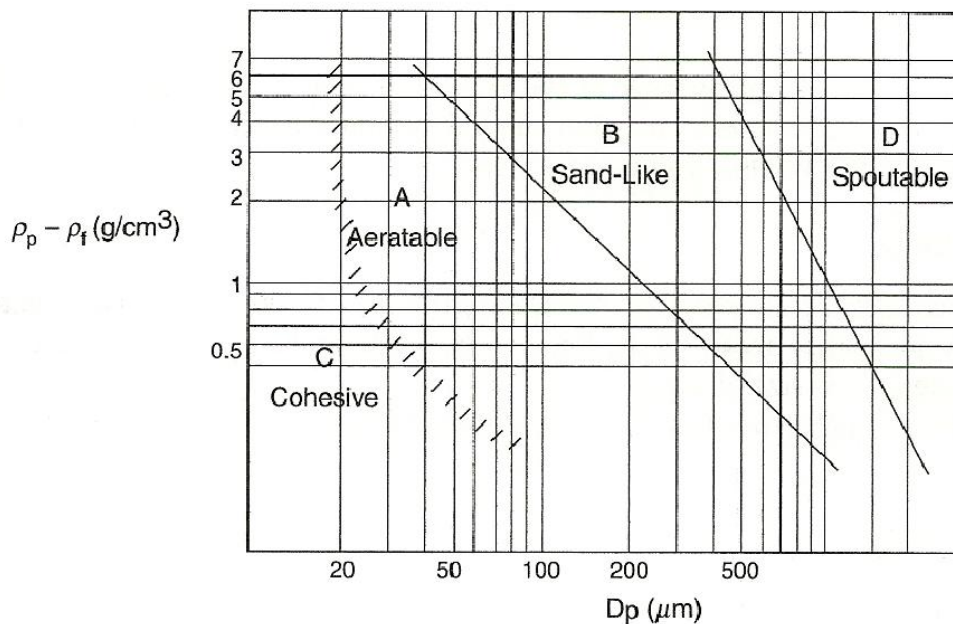


Figura 2.4. Relación entre la densidad y el diámetro en la escala de Geldart [1].

Existen los siguientes regímenes de fluidización:

A. Régimen de mínima fluidización

Ocurre cuando la velocidad del gas solo es capaz de contrarrestar el peso de las partículas, la más mínima disminución de la velocidad del gas y el lecho dejaría de estar fluidizado. Por lo tanto en este estado las partículas se encuentran en suspensión sin movimiento aparente, véase la figura 2.5. En este estado aumenta la porosidad del lecho ya que la distancia entre las partículas aumenta. La velocidad a la que el lecho comienza

a adquirir las propiedades típicas de un fluido se denomina *velocidad de mínima fluidización*.



Figura 2.5. Régimen de mínima fluidización [1]

B. Régimen burbujeante

Si se sigue aumentando la velocidad del gas por encima de la velocidad de mínima fluidización entra en el denominado régimen burbujeante, como se aprecia en la figura 2.6. Este régimen se caracteriza por la aparición de burbujas que ascienden a través del lecho. Estas burbujas pueden unirse a otras burbujas a medida que ascienden dando lugar a burbujas de mayor tamaño. Una vez que las burbujas llegan al límite del volumen ocupado por las partículas desaparecen arrojando las partículas arrastradas en la subida.



Figura 2.6. Régimen burbujeante [1]

C. Slugging

El fenómeno de *slugging* consiste en la coalescencia de burbujas hasta que estas ocupan toda la sección del lecho véase la figura 2.7, provocando grandes variaciones de presión y arrastrando a gran parte de las partículas del lecho haciendo necesario el uso de ciclones que son elementos de sedimentación por fuerza centrífuga.

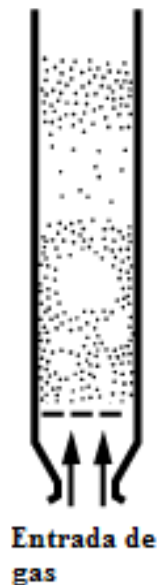


Figura 2.7. Fenómeno de Slugging [1]

D. Régimen turbulento

Si se sigue aumentando la velocidad del gas por encima de la que tenemos en régimen burbujeante, entramos en el denominado régimen turbulento (figura 2.8). Esto provoca que aumente el tamaño de las burbujas, haciendo que muchas de ellas exploten y esto va dando lugar a un lecho donde cada vez es más difícil distinguir con claridad las zonas ocupadas por las burbujas de las que están ocupadas por las partículas fluidizadas. En su lugar la estructura del lecho comienza a ser la de columnas de partículas con movimiento caótico separadas por espacios de gas de formas diversas. La superficie del lecho pasa de ser una separación nítida entre las fases sólida y gaseosa a ser una superficie irregular y cambiante con intensos lanzamientos de aglomerados de partículas hacia la parte superior del lecho que después vuelven a caer.

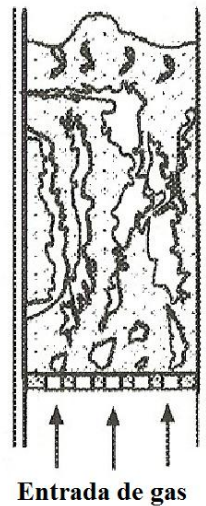


Figura 2.8. Régimen turbulento [1].

E. Régimen de fluidificación rápida

A diferencia del régimen anterior donde los conglomerados de partículas eran demasiado pesados para ser transportados, en el régimen de fluidificación rápida buena parte de las partículas son arrastradas fuera del lecho tanto de forma individual como formando conglomerados, por lo que será necesario realizar un mayor aporte de partículas al lecho para compensar las pérdidas de sólidos.

Se trata de un caso de transición entre los regímenes de fluidificación y los de transporte neumático donde sea cual sea el tamaño de los conglomerados éstos son arrastrados por el gas.



Figura 2.9. Régimen de fluidización rápida [1]

2.4 Ventajas y desventajas de los lechos fluidizados

Las principales ventajas de los lechos fluidizados respecto a otras tecnologías de combustión del carbón son las siguientes:

1. Al tener un comportamiento similar a un fluido, supone que los sistemas de alimentación del combustible, la eliminación de cenizas y la automatización y control del equipo son relativamente sencillas, similar a los que se dan cuando se utilizan combustibles líquidos.
2. La distribución de temperaturas del lecho es muy uniforme, debido a que el combustible, aún siendo sólido se comporta como un fluido. Ello implica un fácil control y evita temperaturas excesivas y que el nitrógeno del aire se queme con lo que impide que se formen óxidos de nitrógeno que pueden ser muy contaminantes.
3. Desulfuración. En el interior del lecho fluido se pueden introducir absorbentes que eliminen in situ el SO_2 que pueda producirse en la combustión.
4. Admite diversidad de combustibles ya que se pueden modificar las velocidades de fluidización en función de la densidad y tamaño de la partícula de combustible.
5. Alta difusividad del aire de combustión. Como el combustible que participa en el proceso tiene baja granulometría se dispone de una gran superficie específica para la reacción aire-sólido, lo que provocará que la velocidad de combustión sea mayor.
6. Alta transferencia de calor. Se citan del orden de cien veces superior al que tendría un lecho estático. Esta propiedad hace que se tienda a montar el intercambiador de calor del combustor en el seno del lecho fluidizado.
7. No formación de escorias. Como la temperatura apenas supera los 900°C las cenizas no funden y son fáciles de retirar. Tampoco se forman escorias en los tubos del intercambiador de calor y paredes de la caldera.
8. Menor temperatura de rocío. Ocasionada por la eliminación de los óxidos de azufre existentes en los humos de combustión. Esta disminución contribuirá a una mayor recuperación del calor sensible que arrastran éstos.
9. Menor exceso de aire de combustión, provocado por la mayor superficie de contacto entre el combustible y el aire, utilización de un inerte y mayor rendimiento.

Los principales inconvenientes son los siguientes:

1. La abrasión del lecho y de las tuberías por las partículas.
2. Las partículas pueden ser arrastradas por lo que necesitan ser reemplazadas y es necesario el uso de ciclones.
3. A consecuencia del intenso proceso de mezclado las partículas del lecho pueden romperse produciendo partículas más pequeñas, por lo que será necesario renovarlas con cierta frecuencia.

4. El tiempo que permanecen las partículas en el lecho puede no ser uniforme y esto puede dificultar los procesos con transformaciones químicas.

2.5 Usos industriales de la fluidificación

Las cualidades de los lechos fluidos los convierten en muy útiles en numerosos procesos industriales entre los que destacan los siguientes:

2.5.1 Operaciones físicas

A. Intercambio y recuperación de calor

Debido a su gran capacidad de transferencia de calor y a que son capaces de mantener la temperatura uniforme se utilizan para enfriar aleaciones rápidamente y obtener propiedades interesantes.

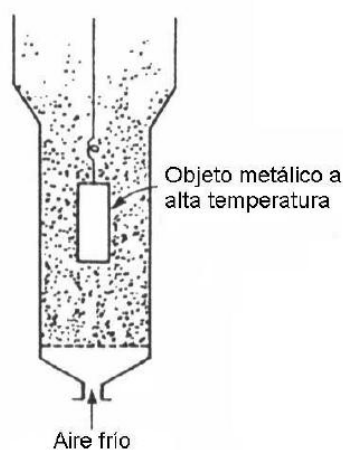


Figura 2.10.Enfriamiento rápido de metales [2].

También se pueden utilizar los lechos fluidos para recuperar calor, ya que las partículas que forman el lecho pueden provenir de otro proceso que se encuentre a cierta temperatura.

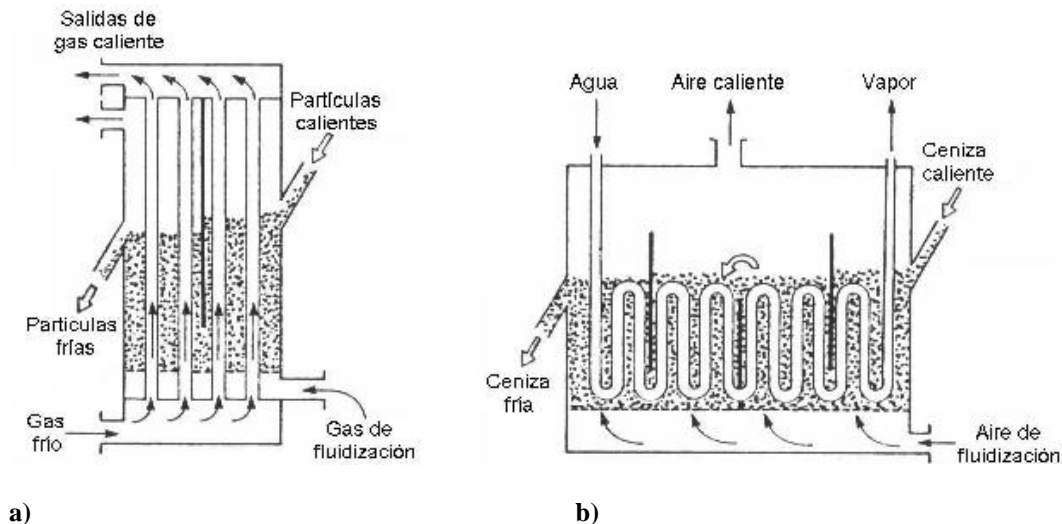


Figura 2.11. Ejemplos de recuperadores de calor [2]: a) Para calentar un gas; b) Para producir vapor de agua.

B. Recubrimiento de objetos metálicos

Mediante los lechos fluidos se pueden realizar recubrimientos plásticos en objetos metálicos, para ello se introduce el objeto que se quiere recubrir en un lecho que contiene partículas finas del material plástico usado para recubrirlo, durante un tiempo breve y a una temperatura superior al punto de fusión del plástico. De esta forma las partículas se funden adhiriéndose a la superficie del metal formando una fina capa sobre ella.

C. Adsorción

Se pueden utilizar los lechos fluidos para la adsorción de algún componente presente en el gas que nos interese eliminar, para ello se tendrá que utilizar un lecho fluido con partículas adsorbentes y el proceso se verá facilitado por la gran capacidad de mezclado del lecho. Saldrá el aire limpio por la parte superior del lecho y las partículas con el material adsorbido por la parte inferior.

Ejemplos de esta aplicación son la retirada de solventes como el bisulfuro de carbono, acetona y etanol; o la eliminación de trazas contaminantes en gases residuales.

D. Secado de sólidos

Los lechos fluidizados se utilizan para el secado de sólidos siempre que estos puedan ser fluidizados por una corriente de aire caliente. Se utilizan fundamentalmente en el secado de arenas, polímeros, minerales, productos farmacéuticos y fertilizantes debido a la fácil construcción, uso sencillo y alta eficiencia térmica.

Los lechos fluidizados utilizados en este tipo de procesos suelen operar en regímenes turbulentos debido a su alta capacidad de mezclado.

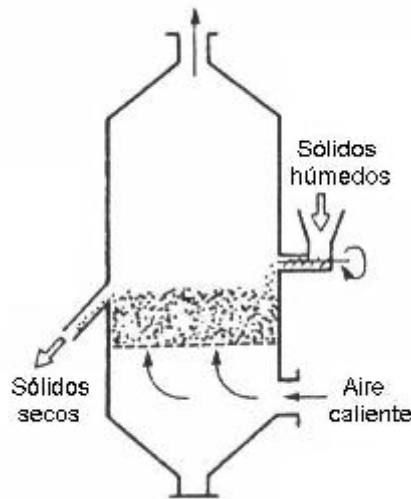


Figura 2.12. Secado de sólidos [2].

2.5.2 Reacciones de síntesis

Existen muchas reacciones que solo se pueden llevar a cabo en unos rangos de temperatura muy determinados, bien porque fuera de esos márgenes puedan convertirse en reacciones explosivas o simplemente los productos buscados se dan solo en ese determinado margen de temperaturas. Además estas reacciones suelen ser fuertemente exotérmicas, dificultando el control de la temperatura.

Al ser los gases malos conductores del calor y tener bajos valores de capacidad calorífica, dificultan la distribución de calor cuando tenemos reacciones fuertemente exotérmicas.

Para poder realizar estos procesos eran necesarios grandes intercambiadores de calor y tener los gases bastante diluidos, por eso los lechos fluidos con su gran capacidad de mezclado y el uso de partículas con unas capacidades caloríficas relativamente altas permiten controlar eficazmente la temperatura.

Algunos ejemplos de síntesis donde se utilicen lechos fluidos son la producción de anhídrido naftalénico, acrílico nitrilo, la síntesis de Fischer-Tropsch, el acetato de vinilo o el clorometano.

2.5.3 Combustión e incineración

A. Combustión del carbón

A raíz de la crisis del petróleo de la década de 1970 se comenzó a investigar en como quemar el carbón de baja calidad que no se podía quemar eficientemente en las calderas convencionales, por lo que en esta época tuvieron un gran desarrollo los lechos fluidizados.

Actualmente su uso se debe principalmente a motivos medioambientales debido a su capacidad de reducir las emisiones de óxidos de azufre gracias al uso de partículas de CaCO_3 en el lecho fluido y a su capacidad de reducir las emisiones de óxidos de

nitrógeno por las temperaturas no demasiado elevadas que se dan en el lecho (alrededor de 850°C).

B. Incineración de residuos sólidos

Uno de los problemas más importantes al incinerar residuos sólidos es la producción de fuertes olores, lo cual es un problema ya que muchas veces es necesario realizarlo en poblaciones urbanas o en sus cercanías.

La combustión en lecho fluido permite una combustión más eficiente que los sistemas tradicionales de parrilla, por lo que la emisión de cenizas es menor. Al igual que en el caso del carbón también se puede añadir partículas de CaCO_3 al lecho para reducir las emisiones de óxidos de azufre.

En el proceso los residuos sólidos se trituran, habiéndose eliminado previamente los residuos metálicos y después se introducen en el lecho quemándose a unos 900°C. El calor sobrante se evacua mediante agua, pudiéndose aprovechar para generar energía y las cenizas se eliminan por la parte inferior del lecho.

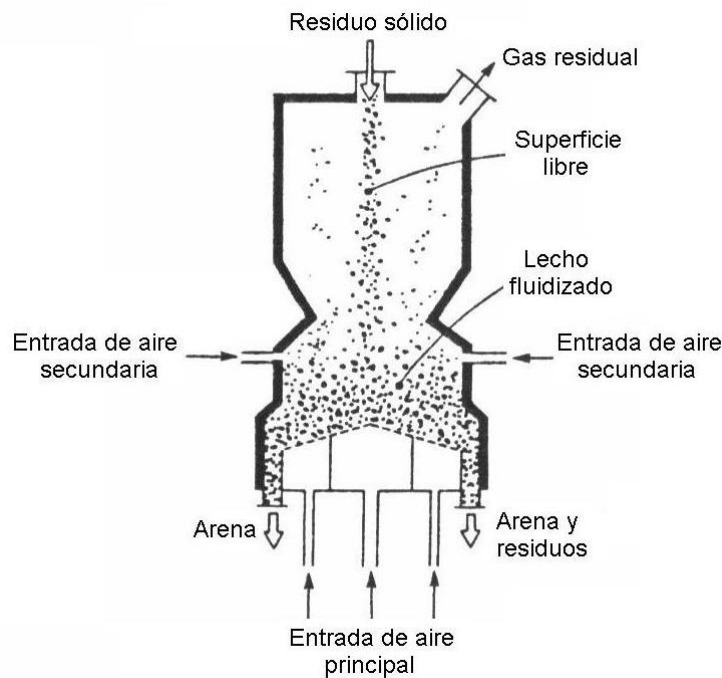


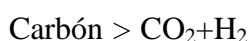
Figura 2.13. Incineración de residuos mediante lecho fluido [2].

2.5.4 Gasificación

A. Gasificación del carbón

El primer uso comercial de los lechos fluidos fue la gasificación del carbón para obtener energía, y consiste en quemar el carbón con muy poco oxígeno de forma que se convierte en gas el combustible sólido y se facilita la eliminación de impurezas.

La reacción principal que tiene lugar es la siguiente:



Mediante la inyección en el lecho fluido de una mezcla de O_2 y vapor de agua.

Se trata de una reacción endotérmica por lo que es necesario suministrar energía al proceso. La gasificación del carbón fue una de las primeras aplicaciones de uso comercial para los lechos fluidizados, pero su uso disminuyó debido al uso de otros gases como el gas natural. En el tema 4 se estudiara más a fondo el proceso de gasificación. En la figura 2.14 se aprecia un modelo de gasificador de carbón [2].

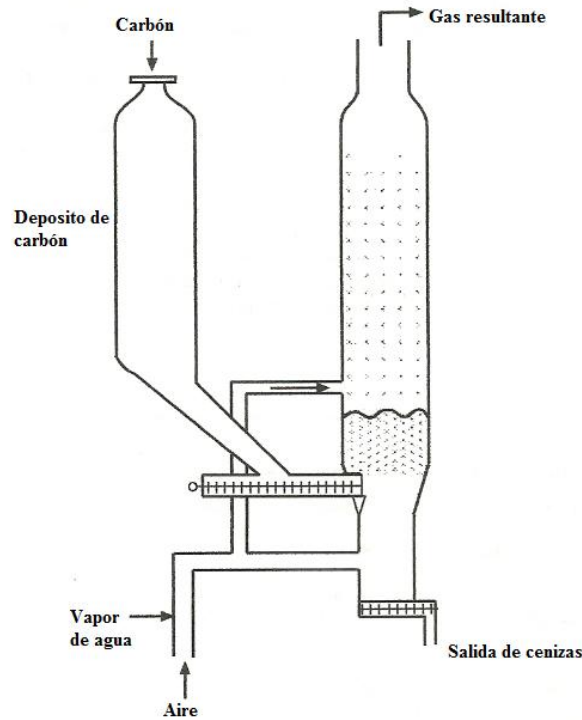


Figura 2.14. Gasificación del carbón [2].

B. Gasificación de residuos sólidos urbanos

Los residuos urbanos pueden contener materiales tóxicos, que al incinerarlos hay que tratarlos por cuestiones medioambientales. El uso de lechos fluidos es recomendable para estas operaciones debido a que la emisión de gases es menor que en los sistemas clásicos de incineración.

El diseño que se utiliza para ello es de dos lechos fluidos funcionando en paralelo, ambos en régimen turbulento. En uno se lleva a cabo la combustión de los residuos sólidos con arena y los materiales que salen por la parte superior del lecho se introducen en la parte inferior del otro lecho donde se consumen del todo calentando la arena.

La arena caliente de este segundo lecho se introduce en el primero para aportar la energía necesaria para la gasificación.

2.5.5 Activación del carbón

El carbón activado se utiliza principalmente para eliminar contaminantes mediante adsorción en corrientes líquidas o gaseosas, aunque también se utiliza como catalizador en algunas reacciones y para separar sustancias orgánicas.

Para obtener el carbón activado se realiza lo siguiente:

El proceso se inicia con la etapa de carbonización, de modo que se logre la deshidratación y la desvolatilización de forma controlada, obteniéndose un carbonizado con un elevado por ciento en carbono fijo y una estructura porosa inicial.

Durante la carbonización los elementos no carbonosos, como el hidrógeno y oxígeno, presentes en la materia prima, son eliminados en parte por la pirolisis del material y los átomos de carbono se organizan en estructuras microcristalinas conocidas como "cristalitas grafiticas elementales". Entre estos microcristales hay espacios libres, debido a que su ordenamiento es irregular. Estos espacios o intersticios son bloqueados por carbono amorfo, alquitranes y otros residuos de la descomposición pirolítica del material celulósico.

Como resultado de ello los carbones producto de la carbonización sólo presentan una pequeña capacidad de absorción, aumentándose ésta a través del proceso de activación. La activación se realiza en una segunda etapa a temperaturas de entre 800 y 1100°C en presencia de un oxidante como agente activante que puede ser CO₂ y vapor de agua.

2.5.6 Reacciones con sólidos

Las cualidades de los lechos fluidos pueden ser muy útiles para obtener ciertos minerales. Una aplicación interesante es la obtención de metales mediante la tostación de sulfuros, no menos importante es su uso para la producción de silicio de elevada pureza que será utilizado en semiconductores y células solares.

2.5.7 Biofluidización

El cultivo de microorganismos es una de las aplicaciones más curiosas de los lechos fluidizados. Estos microorganismos se utilizarán para elaborar fármacos, alimentos o para la eliminación de residuos urbanos.

Las ventajas de utilizar lechos fluidizados para el cultivo de microorganismos frente a otros sistemas son las siguientes:

- La gran capacidad de mezclado del lecho aumenta la oxigenación de los microorganismos aumentando con ello su metabolismo.
- El calor y CO₂ que se producen en el proceso son eliminados por el aire de fluidización.
- La temperatura y otras variables como el PH o la humedad se mantienen estables y son fácilmente controlables.

CAPÍTULO 3. HIDRODINÁMICA DEL LECHO FLUIDO

3.1. Hidrodinámica

La principal diferencia entre la combustión en lecho fluido y otros sistemas de combustión es la hidrodinámica del gas. La mayoría de las características operativas surgen de la interacción entre las partículas del sólido con el gas y por eso será tan interesante conocer su comportamiento para los diferentes regímenes de fluidización. Este capítulo expone un breve resumen de la hidrodinámica en lechos fluidizados.

3.1.1 Régimen de mínima fluidización

Ya se vio con anterioridad que la definición de fluidización es la operación mediante la cual finas partículas sólidas se comportan como un fluido al estar en contacto con un gas a cierta velocidad. A esta velocidad se le denomina velocidad de mínima fluidización.

En este momento el lecho presenta las siguientes características:

- La presión estática a cada altura del lecho es aproximadamente igual al peso de los sólidos del lecho por unidad de área por encima de ese nivel.
- Un objeto de gran densidad se hundirá mientras que otro de densidad menor a la del lecho flotará.
- Los sólidos que forman el lecho pueden salir como un fluido a través de un orificio que se le haga al lecho.
- La superficie del lecho se mantiene en horizontal independientemente de cuál sea la inclinación del lecho. También el lecho asume la forma de la vasija que lo contiene.
- Las partículas se encuentran en suspensión pudiendo variar fácilmente de posición unas respecto de otras.
- Las partículas se mantienen bien mezcladas, manteniendo una temperatura uniforme en todo el lecho cuando es calentado.

Al ser arrastradas por el gas las partículas se mantienen en estado de suspensión siempre que la velocidad del gas supere la denominada velocidad de mínima fluidización, es decir aquella en la que la fuerza ejercida por el gas sea capaz de contrarrestar el peso de las partículas. Para cualquier velocidad inferior el gas es incapaz de sustentar las partículas, limitándose a circular por los poros que presente el lecho.

Para obtener la velocidad de mínima fluidización se necesita igualar la presión provocada por el gas sobre las partículas con la que es causada por el peso de estas.

Podemos considerar el lecho como un medio poroso donde se produce una caída de presión al circular aire a través de él. La caída de presión será menor cuando mayor sea la porosidad del medio.

La caída de presión en función de la altura para un tamaño uniforme de partículas viene dado por la siguiente expresión (Ergun, 1952):

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu U}{(\phi d_p)^2} + 1,75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho_g U^2}{\phi d_p} \quad (3.1)$$

Donde ε es la porosidad del lecho, ϕ la esfericidad de las partículas, μ es la viscosidad dinámica, ρ_g es la densidad del gas y U es la velocidad superficial del gas.

El primer término de la ecuación corresponde a los esfuerzos de fricción mientras que el segundo corresponde a la componente inercial. Si hacemos circular el aire a baja velocidad los esfuerzos de fricción serán dominantes mientras que a mayor velocidad los esfuerzos inerciales comenzaran a ser más importantes por la energía cinética del aire.

Por otro lado la fuerza de arrastre provocada por los gases que tendrá que mantener en suspensión a las partículas del lecho vendrá dada por la siguiente ecuación:

$$F_D = \Delta P A = A L (1 - \varepsilon) (\rho_p - \rho_g) g \quad (3.2)$$

Donde A y L son la sección horizontal y la altura del lecho respectivamente y se ha tenido en cuenta la porosidad del lecho. La velocidad de mínima fluidización se obtendrá resolviendo las anteriores ecuaciones simultáneamente obteniendo la siguiente ecuación:

$$Re_{mf} = \frac{U_{mf} \rho_p d_p}{\mu} = (C_1^2 + C_2 Ar)^{0.5} - C_1 \quad (3.3)$$

Donde Ar es el número de Arquímedes,

$$Ar = \frac{\rho_g (\rho_p - \rho_g) g d_p^3}{\mu^2} \quad (3.4)$$

d_p es el diámetro de las partículas y U_{mf} es la velocidad de mínima fluidificación que se está buscando.

Los valores de las constantes C_1 y C_2 son 27,2 y 0,0408 y proceden de pruebas experimentales (Grace, 1982) [18].

3.1.2 Régimen burbujeante

El régimen burbujeante aparece al aumentar la velocidad del gas por encima de la velocidad de mínima fluidización. Esto provoca que aparezcan burbujas de gas que ascienden rápidamente a través del lecho. Parte de las partículas son arrastradas por las

burbujas en su ascenso hasta que caen de nuevo al desaparecer las burbujas, generalmente por erupción al llegar al límite del volumen ocupado por las partículas (Superficie libre del lecho).

El resto de las partículas se mantienen en estado de mínima fluidización con el gas pasando a su alrededor a la velocidad de mínima fluidización y sin ser arrastradas por las burbujas.

Esto crea movimientos ascendentes y descendentes dentro del lecho. Para bajas velocidades las partículas suelen ascender por las regiones cercanas a las paredes y descender por la parte central del lecho, mientras que el proceso se invierte para velocidades mayores donde suelen ascender por la parte central. Aunque se pueden dar diferentes configuraciones en función de la forma del lecho y de la velocidad del gas con la formación de múltiples remolinos.

El tamaño y la velocidad de las burbujas es mayor a medida que la velocidad del gas aumenta. El diámetro de las burbujas viene dado por la siguiente expresión [1]:

$$d_{bm} = 0,65 \left[\frac{\pi}{4} D^2 (U - U_{mf}) \right]^{0.4} \quad (cm) \quad (3.5)$$

Donde D es el diámetro de la vasija y U la velocidad superficial a la que se inyecta el gas. La velocidad de ascensión de las burbujas viene dada por la siguiente expresión:

$$u_{bs} = 0,711 \sqrt{g d_b} \quad (3.6)$$

Esta no es la velocidad absoluta de ascenso de las burbujas, se trata de la velocidad de las burbujas relativa al lecho solido donde se encuentran las partículas en suspensión. Cuando una nueva burbuja entra por la parte inferior del lecho, desplaza a las partículas un volumen correspondiente a ella misma provocando el ascenso de la fase solida con una velocidad (U-U_{mf}). Nosotros no vemos ascender a la fase solida a través del lecho porque vuelve a caer tan pronto la burbuja explota. Por lo tanto la velocidad absoluta de las burbujas vendrá dada por la siguiente ecuación:

$$U_b = U - U_{mf} + u_{bs} \quad (3.7)$$

Donde U es la velocidad superficial del gas y U_{mf} la velocidad de mínima fluidización.

3.1.3 Fenómeno de Slugging

Se forma cuando las burbujas en su ascenso se unen para dar lugar a una burbuja de mayor tamaño que crece hasta el tamaño del diámetro del lecho.

Esto provoca el arrastre de gran cantidad de partículas de forma parecida a como lo haría un embolo, cayendo violentamente al llegar a la superficie. Una condición necesaria para la formación de este fenómeno es que el diámetro máximo estable de la burbuja sea mayor a 0,6 veces el diámetro del lecho (Geldart,1986) [19]. El Slugging,

naturalmente no ocurre bajo las condiciones normales de funcionamiento. Expresado en una ecuación, se tendrá el fenómeno de Slugging al cumplirse:

$$\frac{U_t^2}{gD} \geq 0,123 \quad (3.8)$$

Donde U_t es la velocidad terminal de una partícula de tamaño medio del lecho. La velocidad mínima de formación de Slugging viene dada por la siguiente ecuación:

$$U_{s1} = U_{mf} + 0,07(gD)^{0.5} \quad (3.9)$$

Donde D es el diámetro del lecho. Para un lecho rectangular o de sección de cualquier otra forma, D vendrá dado por:

$$D = \frac{4 \cdot \text{Area}}{\text{Perímetro}} \quad (3.10)$$

Este proceso suele evitarse en aplicaciones comerciales debido a que el mezclado no es continuo y a los bruscos cambios de presión provocados por la formación y posterior explosión de grandes burbujas.

Una forma de evitar el slugging es inyectar el gas por una placa agujereada de forma que este entre por unas zonas muy localizadas dificultando de esa forma la formación de grandes burbujas.

3.1.4 Régimen turbulento

A medida que aumentamos la velocidad del gas inyectado aumenta la fracción del lecho ocupado por las burbujas. También se van uniendo unas burbujas a otras formando burbujas de mayor tamaño, muchas de las cuales crecen por encima del tamaño máximo al cual son estables por lo que acaban explotando. Por lo que se pasa de un régimen donde las burbujas son claramente visibles a otro donde es más difícil distinguirlas de las zonas ocupadas por las partículas fluidizadas.

La superficie del lecho deja de ser una línea nítida para convertirse en una superficie irregular y variable donde son lanzados aglomerados de partículas a la parte superior del lecho. Estos aglomerados son todavía lo suficientemente pesados como para que el aire sea incapaz de arrastrarlos, no así las partículas sueltas que sí son arrastradas por la corriente que habrá que ir reponiendo.

El paso de régimen burbujeante o slugging a régimen turbulento no es homogéneo en todo el lecho, sino que se origina en la parte superior del lecho y progresivamente se va extendiendo a las zonas inferiores a medida que aumenta la velocidad.

La presión necesaria para la fluidificación también varía debido a que las burbujas al explotar generan una onda de presión. Existe una velocidad a la cual el agrupamiento y explosión de burbujas es máximo y a partir de esta la presión se estabiliza cuando ya se alcanza un régimen completamente turbulento. La presión a la velocidad de inicio de

régimen turbulento U_c puede ser un 20-25 % superior que la que se tiene a partir de la velocidad de final de transito a turbulento U_k .

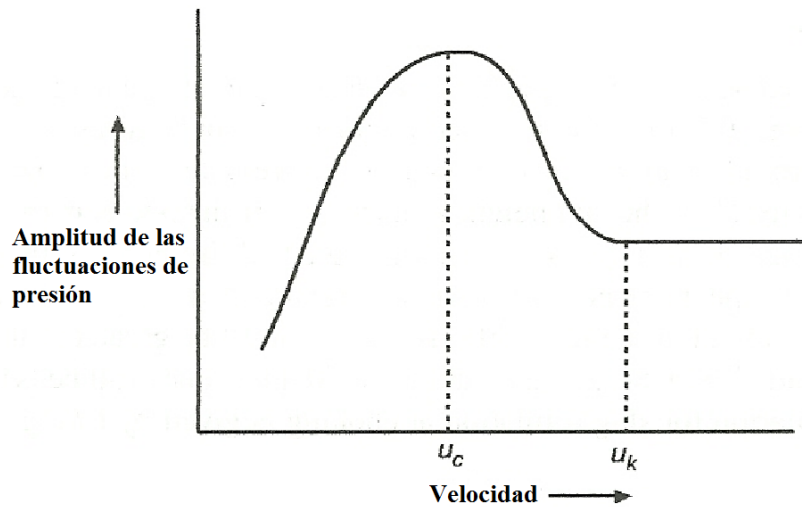


Figura 3.1 Variación de la presión con la velocidad [1].

Un concepto importante en este régimen es que se opera a velocidades por encima de la denominada *velocidad terminal*, y es aquella en la cual las partículas comienzan a ser arrastradas. El que solo sean arrastradas una pequeña parte de las partículas es debido a que estas forman aglomerados que son muy pesados para esta velocidad.

Si analizamos las fuerzas que actúan sobre una partícula bajo los efectos del gas a la velocidad terminal:

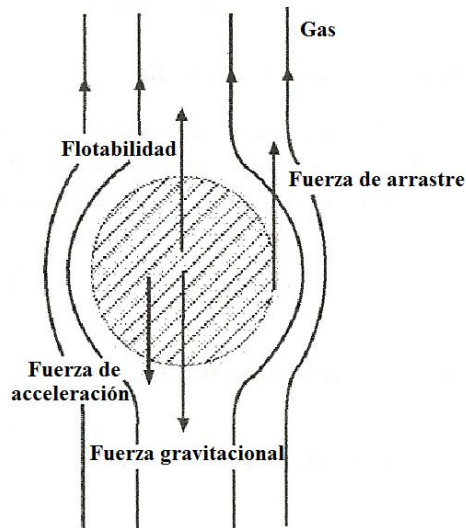


Figura 3.2 Balance de fuerzas en una partícula del lecho [1].

La fuerza de arrastre se define como:

$$F_D = C_D \frac{\pi d_p^2}{4} \left(\frac{\rho_g U^2}{2} \right) \quad (3.11)$$

Donde U es la velocidad del gas y C_D es el coeficiente de arrastre que es función del número de Reynolds, $Re = (d_p U \rho_g / \mu)$

Las leyes de variación de C_D en función del número de Reynolds vienen expresados por:

$$C_D = \frac{a_1}{Re^{b_1}} \quad (3.12)$$

Donde las constantes a_1 y b_1 están definidas (Howard, 1989) [20].

| Rango de Re | Región | a_1 | b_1 |
|---------------------------------|-----------------------|-------------------------|-------------------------|
| $0 < Re < 0.4$ | <i>Ley de Stockes</i> | 24 | 1,0 |
| $0.4 < Re < 500$ | <i>Ley Intermedia</i> | 10 | 0,5 |
| $500 < Re$ | <i>Ley de Newton</i> | 0,43 | 0,0 |

Siendo la velocidad del gas U y la velocidad de la partícula U_s tenemos:

la fuerza de la gravedad= flotabilidad+ la fuerza de arrastre

$$m_p g = m_p \frac{\rho_g g}{\rho_p} + C_D \frac{\pi (U - U_s)^2 \rho_g}{8} d_p^2 \quad (3.13)$$

Donde m_p , es la masa de la partícula, ρ_g , es la densidad del gas y ρ_p es la densidad de los sólidos. El límite de la velocidad relativa $U - U_s$, es decir la velocidad de la partícula cuando la velocidad del gas U es cero, se denomina *velocidad terminal*. Es esencialmente la velocidad de deslizamiento entre el fluido y la partícula en régimen neumático.

Velocidad terminal en partículas esféricas

Para calcular los coeficientes de arrastre apropiados, se pueden simplificar las ecuaciones haciendo uso del número de Arquímedes Ar , definido ahora como:

$$Ar = \frac{3}{4} C_D \left[\frac{d_p (U - U_s) \rho_g}{\mu} \right]^2 \quad (3.14)$$

$$\text{Ley de Stockes, } Re < 0,4: \quad \frac{d_p U_t \rho_g}{\mu} = \frac{Ar}{18} \quad (3.15)$$

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

$$\text{Ley intermedia } 0.4 < R_e < 500 \quad \frac{d_p U_t \rho_g}{\mu} = \left[\frac{A_r}{7.5} \right]^{0.666} \quad (3.16)$$

$$\text{Ley de Newton } 500 < R_e \quad \frac{d_p U_t \rho_g}{\mu} = \left[\frac{A_r}{0.33} \right]^{0.5} \quad (3.17)$$

Velocidad terminal en partículas no esféricas

En partículas no esféricas hay que usar un factor corrector K_t que tenga en cuenta la esfericidad de las mismas.

$$U_t = K_t U_{t(esferica)} \quad (3.18)$$

Cuando la esfericidad ϕ se encuentra entre 0,67 y 0,996 el factor de corrección K_t se puede obtener:

$$\text{Para } R_e < 0.2 \quad K_t = 0.843 \log_{10} \left[\frac{\phi}{0.065} \right] \quad (3.19)$$

$$\text{Para } R_e < 1000 \quad K_t = \left[\frac{4(\rho_p - \rho_g)g d_v}{3\rho_g(5.31 - 4.88\phi)} \right]^{0.5}$$

Donde d_v es el diámetro para el volumen medio de la partícula.

Para R_e entre 0,2 y 1000, K_t se obtiene interpolando entre los 2 valores anteriores

3.1.5 Régimen de fluidificación rápida

A diferencia del régimen anterior donde solo un pequeño porcentaje de las partículas eran arrastradas por la corriente, en este régimen también buena parte de los aglomerados son arrastrados por la corriente por lo que se necesitara un aporte mayor de partículas al lecho. En este régimen es muy frecuente el uso de ciclones en los cuales se recuperan las partículas arrastradas por la corriente para que se vuelvan a inyectar al lecho.

El régimen de fluidificación rápida es un estado de transición entre los regímenes de fluidificación y los regímenes de transporte neumático donde todas las partículas son arrastradas por el gas.

No es fácil distinguir los límites entre los que se produce el régimen de fluidificación rápida y una forma de hacerlo es mediante la presión de operación.

Si se está funcionando en régimen neumático, la presión necesaria será la que se necesita para vencer el rozamiento del flujo del gas con las paredes del lecho. Si se reduce la velocidad del gas se reducirá el rozamiento y por lo tanto la presión necesaria disminuirá, pero llega un momento en que la tendencia se quiebra y se necesita una mayor presión de operación debido a que se forman los primeros conglomerados, con

ello aumenta el rozamiento y por lo tanto la presión. Este punto indica la transición a régimen neumático.

Si seguimos disminuyendo la velocidad, los aglomerados comienzan a depositarse en la parte inferior y solo las partículas más pequeñas son arrastradas por el gas. A esta velocidad se la denomina *choking velocity* e indica la transición a régimen turbulento donde la presión se estabiliza.

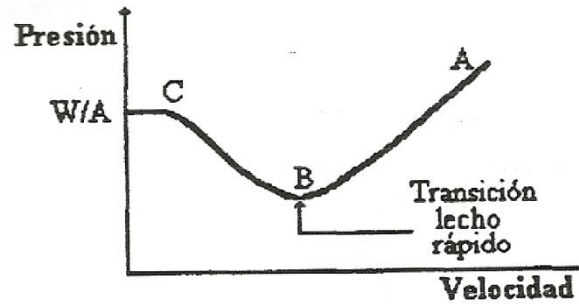


Figura 3.3 Grafica presión-velocidad [2].

CAPÍTULO 4. COMBUSTIÓN Y GASIFICACIÓN EN LECHOS FLUIDIZADOS

4.1. Teoría

Una de las utilizaciones más importante de los lechos fluidos, es la gasificación de carbón para obtener un gas denominado syngas, que básicamente es un gas formado por CO y H₂, y que con una posterior purificación puede ser utilizado en células de combustible o quemado en una central térmica para obtener energía.

El gas utilizado para la gasificación puede ser aire u oxígeno. Si se utiliza aire el gas producido tiene un poder calorífico de entre 5000 y 6000 kJ/kg, mientras que puede llegar a 15.000 kJ/kg al utilizar oxígeno puro ya que se encuentra libre de gases como el nitrógeno que no tienen un valor energético.

Al introducir el carbón en un lecho fluido tienen lugar diferentes procesos físicos y químicos a diferentes temperaturas y son los siguientes:

- | | |
|----------------------|--------------|
| 1. <i>Secado</i> | (>150°C) |
| 2. <i>Pirolisis</i> | (150-700°C) |
| 3. <i>Combustión</i> | (700-1500°C) |
| 4. <i>Reducción</i> | (800-1100°C) |

Los procesos 1,2 y 4 absorben calor proveniente de procesos de combustión exotérmicos. En el secado la humedad que pueda tener el combustible sólido se elimina por evaporación. Con la pirolisis se separan el resto de gases orgánicos como el metano del *char* que es el residuo sólido del carbón. La combustión oxida los componentes del combustible en una reacción exotérmica, mientras que el proceso de gasificación reduce los gases en una reacción endotérmica.

1. Secado

Se trata del primer proceso que se produce al introducir el carbón en el lecho y consiste en perder la humedad que pudiese tener el carbón.

2. Pirolisis

También denominada *gasificación parcial*, fue observada por primera vez en el siglo 17 y después fue utilizada para la producción de gas ciudad en la iluminación de las calles. Actualmente hay un renovado interés en la gasificación parcial para su uso en plantas de generación de ciclo combinado para obtener energía procedente del carbón.

Una serie de complejos procesos físicos y químicos ocurren en la pirolisis, que comienzan a una temperatura de aproximadamente 350°C y continúan realizándose hasta que tenemos una temperatura de 700°C. La composición de los productos

obtenidos es función de la temperatura, presión y composición del gas durante la gasificación.

La pirolisis generalmente produce los siguientes 3 tipos de productos:

- Gases ligeros como H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4
- *Tar*, que es una especie de alquitrán compuesto de sustancias formadas por moléculas orgánicas e inorgánicas muy pesadas y se trata de un líquido viscoso y corrosivo.
- *Char*, que es el residuo sólido principal del carbón cuando se le han eliminado todas las sustancias volátiles y está formado casi en su totalidad por carbono puro.

3. Combustión

La oxidación del combustible es una de las reacciones más importantes que tienen lugar dentro del gasificador, ya que provee de prácticamente toda la energía necesaria en los procesos endotérmicos que tienen lugar.

El oxígeno reacciona con las sustancias presentes en el combustible dando lugar a la formación de CO_2 y H_2O mediante las siguientes reacciones:

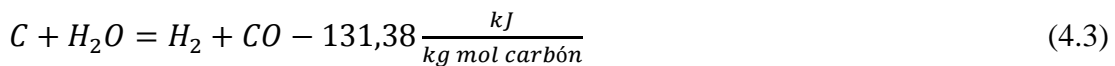


4. Gasificación

La gasificación conlleva una serie de reacciones endotérmicas mantenidas con el calor producido en las reacciones de combustión anteriormente descritas.

Las más importantes son las siguientes:

- Oxidación parcial del carbón con vapor de agua, donde esta puede venir de diversas fuentes como del aire entrante para gasificar el lecho, de la propia humedad del carbón o procedente de la pirolisis del combustible. El vapor reacciona con el carbón mediante la siguiente reacción heterogénea:



- La reacción de Boudouard, donde el dióxido de carbono reacciona con el *char* para producir CO de acuerdo con la siguiente reacción endotérmica:



- La reducción del vapor de agua con monóxido de carbono para producir hidrógeno mediante la siguiente ecuación:

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.



- Formación de metano mediante la siguiente ecuación:



Esta última reacción puede ser acelerada mediante catalizadores a 1100°C y una presión de 6 a 8 bares, y se puede utilizar esto cuando se va a usar el metano en posteriores procesos químicos.

4.2. Composición del gas obtenido

La composición del gas obtenido en el gasificador depende de una serie de parámetros, y son los siguientes:

1. La composición del combustible.
2. El medio utilizado para la gasificación.
3. La presión de operación.
4. Temperatura.
5. Humedad contenida en el combustible.
6. Modo en que los reactantes entran en contacto dentro del gasificador.

Es muy difícil predecir la composición exacta del gas. El estudio del equilibrio químico de los componentes del gas a menudo proporciona información útil del funcionamiento del generador.

Sin embargo, Li et al (2004) [21] encontró que los productos de la gasificación variaban de sus valores de equilibrio, pero en cualquier caso daban unos buenos valores de partida. El equilibrio químico requiere para cada temperatura una constante de equilibrio, y dándole el suficiente tiempo los gases alcanzarían la concentración de equilibrio.

Por ejemplo para el caso de la reducción del vapor de agua mediante monóxido de carbono la constante de equilibrio se escribe:

$$K_{ps} = \frac{[CO_2][H_2]}{[CO][H_2O]} \quad (4.7)$$

Donde $[CO_2]$, $[H_2]$, $[CO]$ y $[H_2O]$ son las concentraciones de equilibrio para el CO_2 , H_2 , CO y H_2O expresadas en sus respectivas presiones parciales.

Algunos valores de las constantes de equilibrio de las ecuaciones a diferentes temperaturas son los siguientes, Li Xuantian(2005) [22]:

| Temperatura (k) | $C + H_2O = H_2 + CO$ | $CO_2 + C = 2CO$ | $C + 2H_2 = CH_4$ |
|-----------------|-----------------------|------------------|-------------------|
| 400 | $7,709.10^{-11}$ | $5,225.10^{-14}$ | $2,989.10^5$ |
| 600 | $5,058.10^{-5}$ | $1,870.10^{-6}$ | $9,235.10^1$ |
| 800 | $4,406.10^{-2}$ | $1,090.10^{-2}$ | $1,339.10^0$ |
| 1000 | $2,617.10^0$ | $1,900.10^0$ | $9,632.10^{-2}$ |
| 1500 | $6,081.10^2$ | $1,622.10^3$ | $2,505.10^{-3}$ |

Tabla 4.1. Constantes de equilibrio, Li Xuantian (2005) [22].

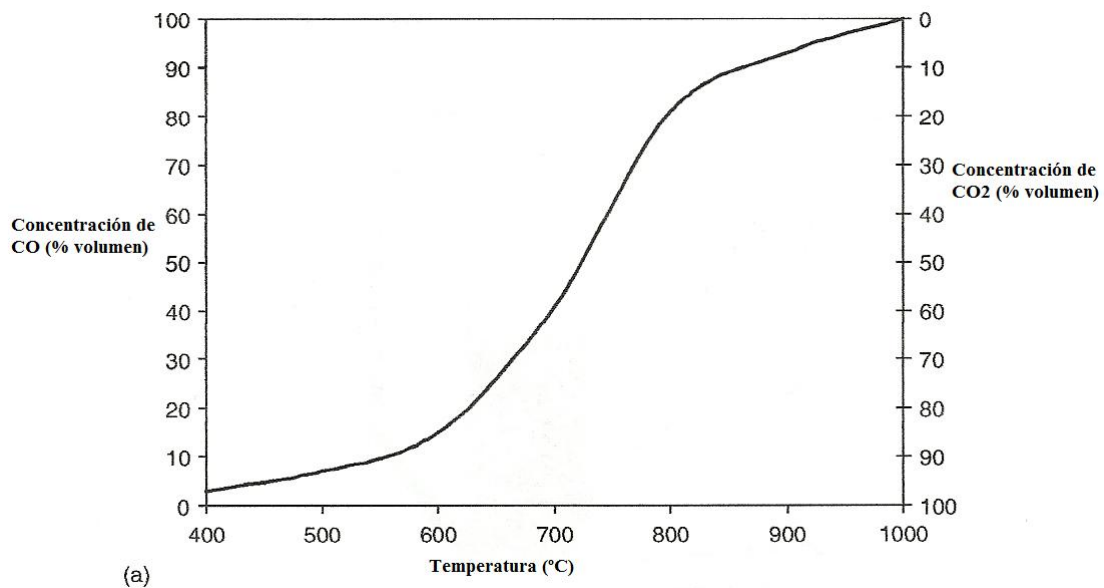
4.3. Efecto de los parámetros de operación en la gasificación

Como se ha comentado anteriormente, la composición del gas procedente de la gasificación, que es una mezcla de monóxido de carbono, metano, hidrogeno, nitrógeno, dióxido de carbono, etc., depende de los parámetros de operación y de las características del combustible. Aunque algunos de los parámetros de operación, como la temperatura y la presión tienen un impacto muy fuerte en la composición del gas resultante.

La siguiente sección describe los efectos de la temperatura y la presión en las reacciones de gasificación vistas anteriormente:

- *Reacción de Boudouard*

La figura 4.1. a) muestra la variación volumétrica de la concentración de monóxido de carbono con la temperatura a la presión de 1 atm. Se puede observar en el gráfico que las altas temperaturas favorecen la formación de monóxido de carbono. La presión tiene el efecto contrario. La figura 4.1. b) muestra que a una temperatura dada, el monóxido de carbono es favorecido por las bajas presiones. Por lo tanto, estas figuras sugieren que si un alto contenido en monóxido de carbono es deseado hay que operar a altas temperaturas y bajas presiones.



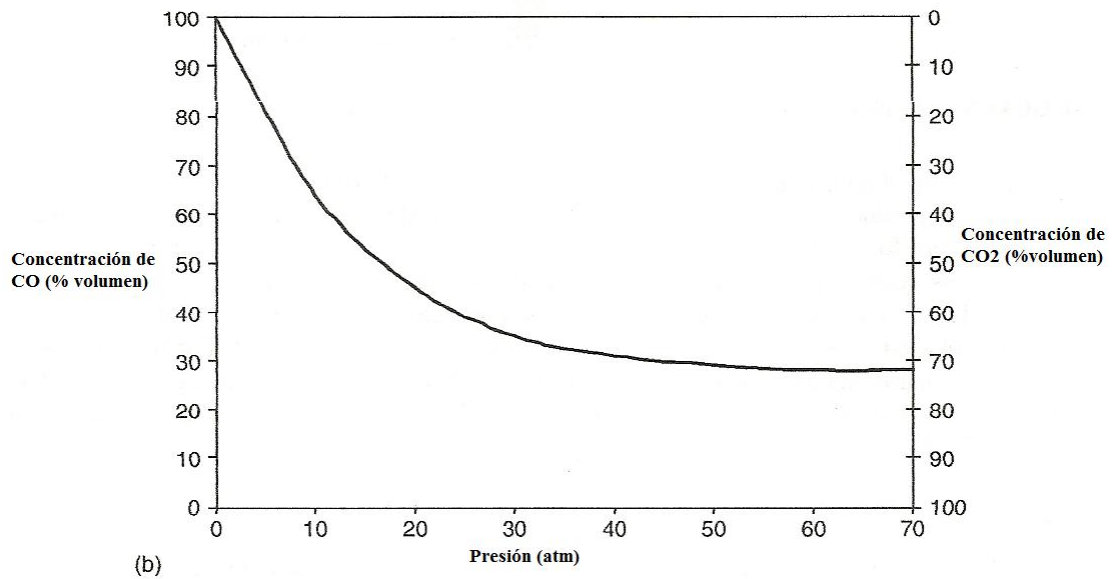
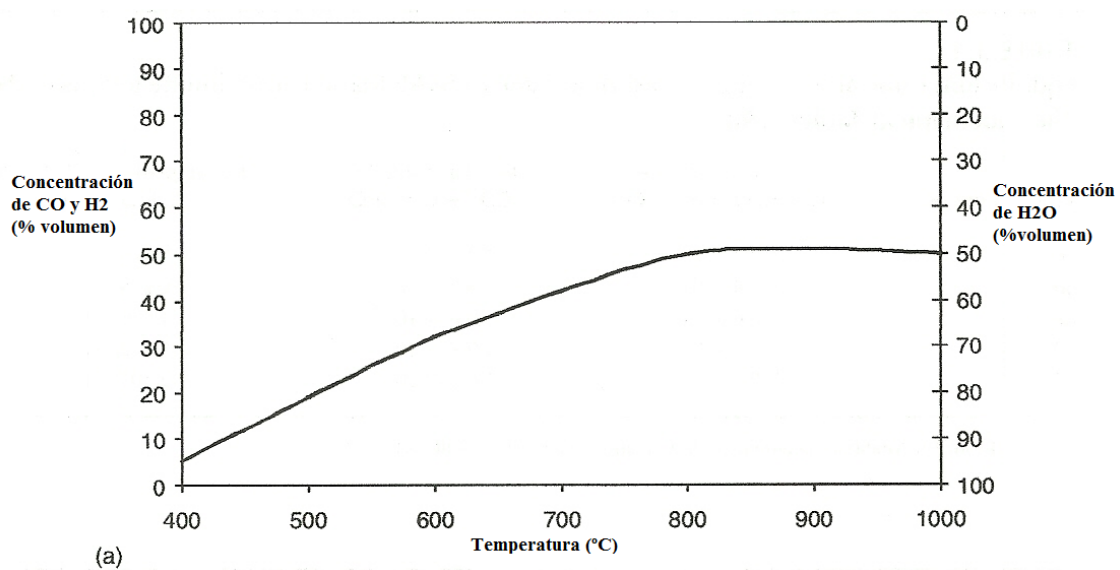


Figura 4.1 Equilibrio de la reacción de Boudouard: Variaciones de la concentración de CO y CO₂; (a) con la temperatura y una presión de 1 atm, y (b) con la presión y una temperatura de 800°C [1].

- *Oxidación parcial del carbón con vapor de agua*

Las figuras 4.2. a) y b) muestran la variación del monóxido de carbono y del hidrogeno con la temperatura a una presión de 1 atm, y de la presión a una temperatura de 800°C respectivamente para la reacción ($C + H_2O = H_2 + CO$). Se puede observar que la concentración de los productos se ve favorecida por las altas temperaturas y bajas presiones.



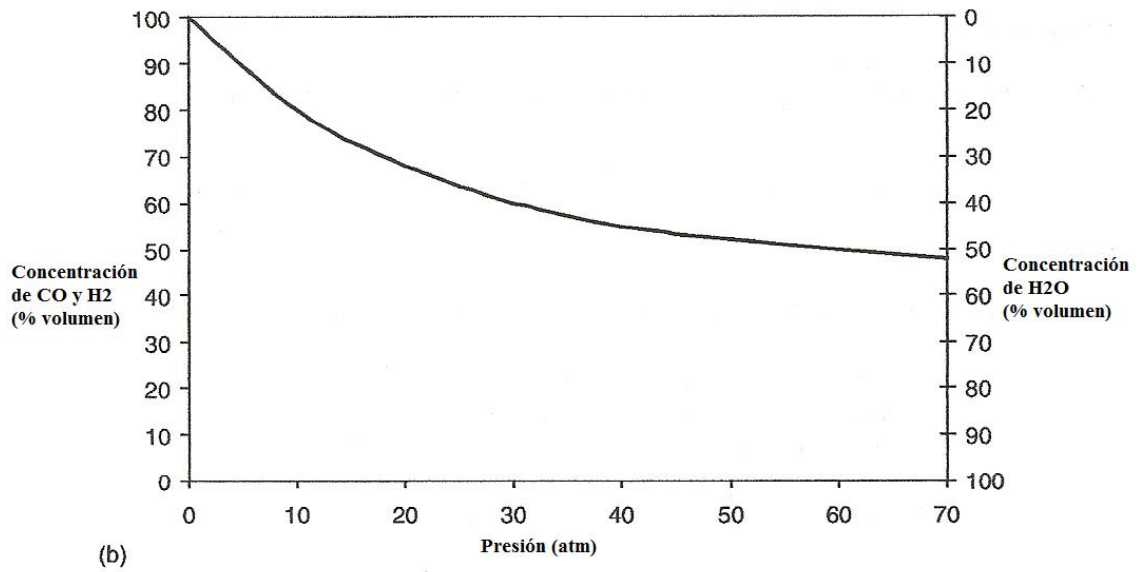
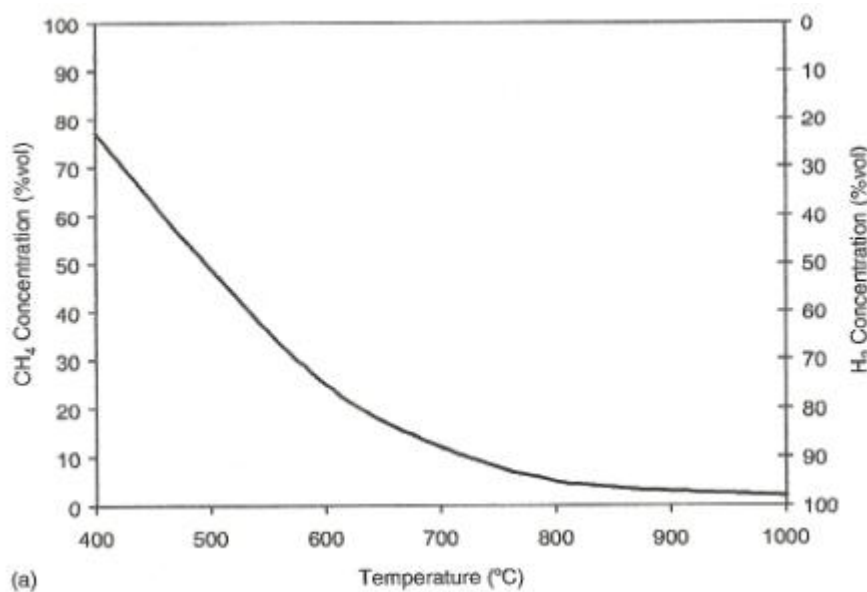


Figura 4.2 Gasificación con vapor: Variación de la concentración de monóxido de carbono, hidrogeno y vapor de agua; (a) con la temperatura a una presión de 1 atm, (b) con la presión a una temperatura de 800°C (1).

- *Formación de metano*

Las figuras 4.3. a) y b) muestran la variación de metano en el gas con la temperatura a una presión dada (1 atm), y con la presión a una temperatura dada (800°C), respectivamente. De estos gráficos se deduce que la formación de metano en la reacción ($C + 2H_2 = CH_4$) se ve favorecida por bajas temperaturas y altas presiones.



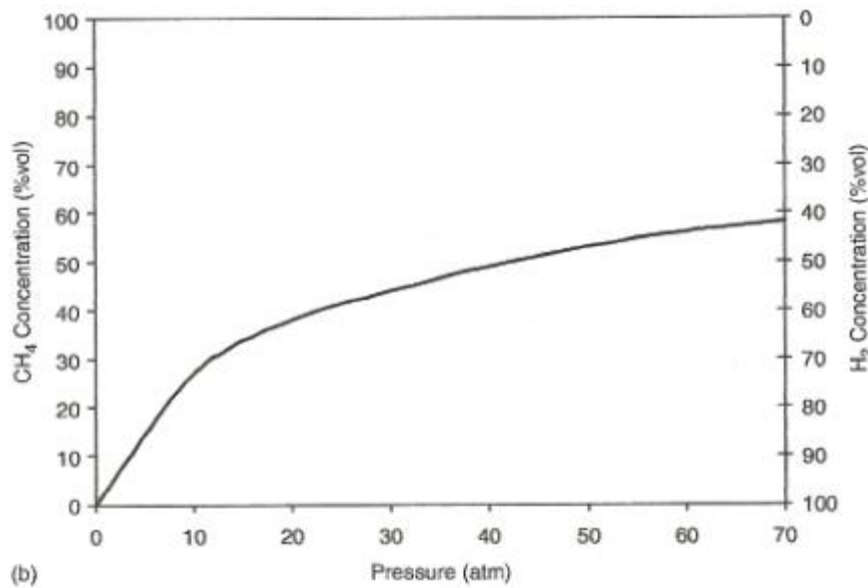


Figura 4.3. Variación de la concentración de metano e hidrógeno en equilibrio; (a) con la temperatura a una presión de 1 atm, (b) con la presión a una temperatura de 800°C [1].

En un gasificador las reacciones tienen lugar de forma simultánea y aunque no se dan las condiciones necesarias para que el equilibrio químico se establezca, las observaciones anteriores proporcionan una buena comprensión de la influencia de los parámetros de operación en la composición del gas.

El aumento del suministro de vapor de agua tiende a aumentar la producción de hidrogeno y disminuir la formación de CO según la ecuación $CO + H_2O = CO_2 + H_2$.

4.4. Efecto de las propiedades del combustible en la gasificación

La siguiente sección describe los efectos de las propiedades del combustible en el gas resultante.

Reactividad del gas

En general, la reactividad del carbón decrece con el aumento del rango, es decir, con su contenido en carbono. Propiedades físicas del carbón, como el tamaño de las partículas y la porosidad tienen efectos significativos en la cinética de la gasificación. Así, cuando menor sea el tamaño de la partícula, la superficie de contacto específica entre el carbón y los gases de la reacción aumenta dando lugar a que estas se realicen a mayor velocidad (Quader, 1985) [23].

Para carbones de bajo y medio rango, la reactividad en la gasificación aumenta con el aumento del volumen de los poros y con el aumento del área de la superficie, pero para carbones de alto rango ($C > 85\%$), la reactividad no se ve afectada por el tamaño de los poros.

Materia volátil

En un medio seco, el contenido de materia volátil en los combustibles varía de menos de un 5% en la antracita a más de un 75% en el caso de la madera. La reactividad de un combustible sólido y su conversión a *char* dentro de un gasificador depende de su contenido en materia volátil. Combustibles con un alto contenido en materia volátil son más reactivos y por lo tanto se convierten más fácilmente en gas, produciendo menos *char*.

En el caso de carbones de alto rango, los cuales son menos reactivos y con menos cantidad de materia volátil, el *char* es el producto mayoritario en la pirolisis.

En los gasificadores alimentados con biomasa, como la madera que es altamente reactiva y con alto contenido volátil, producen relativamente poca cantidad de *char*, siendo este además más poroso. Sin embargo, en estos casos se produce una gran cantidad de alquitrán, dificultando la limpieza posterior del gas.

Cenizas

El contenido en ceniza del combustible no tiene una gran influencia en la composición del gas producido, sin embargo, puede afectar al correcto funcionamiento del gasificador. En los lechos fluidizados, las cenizas se suelen eliminar por la parte inferior del lecho estando estas en estado sólido, por lo que la temperatura del lecho tendrá que ser bastante inferior al punto de fusión de las cenizas.

Humedad

El contenido de humedad de los combustibles sólidos varía ampliamente según el tipo, desde un 5% en el caso de la antracita hasta alrededor de un 40% para carbones de bajo rango como el lignito. La humedad baja la temperatura del gasificador por lo que lo que para obtener resultados satisfactorios en un gasificador de lecho fluido no interesa superar el 10% de humedad.

CAPÍTULO 5. MODELO FÍSICO DEL SISTEMA DE GASIFICACIÓN UTILIZADO

5. MODELO FÍSICO DEL SISTEMA DE GASIFICACIÓN UTILIZADO

El sistema de gasificación se compone de 2 partes; el lecho fluido y la planta de potencia. En este tema se analizarán los modelos físicos de cada uno de ellos.

5.1 MODELO FÍSICO DEL LECHO FLUIDO

5.1.1. Introducción

En este apartado se presentará el modelo físico que ha sido utilizado para diseñar el gasificador a estudio, su geometría, las condiciones de contorno que se han utilizado, los gastos máscicos, y un análisis del carbón utilizado.

5.1.2 Modelo físico

Para poder realizar las simulaciones se va a utilizar un gasificador como el que se expone a continuación, que consistirá en un tubo en el cual se introducen los gases que permiten la fluidización del lecho por su parte inferior; por la parte superior saldrán los productos del proceso de gasificación. También consta de un pequeño orificio lateral por donde se introduce el carbón.

5.1.3. Gasificador a estudio

El gasificador a estudio consiste en un tubo cilíndrico de 2,0 m de altura y una base de 0,22 m de diámetro (Wang et al. 2009) [4] como el que se muestra en la Figura 5.1.

El orificio lateral mide 0,05 m de diámetro que es por donde se introduce el combustible, que va a ser carbón en el presente proyecto. Por la base (distribuidor) se va a introducir una mezcla de aire y vapor de agua que será el gas para fluidizar el lecho. Por la parte superior se evacuarán los gases producidos (syngas).

El lecho inicialmente tiene 1 m de altura (altura del lecho fijo) y está formado por partículas de 0,62 mm de arena y donde posteriormente se introducirán los gases para fluidizar el lecho y el combustible.

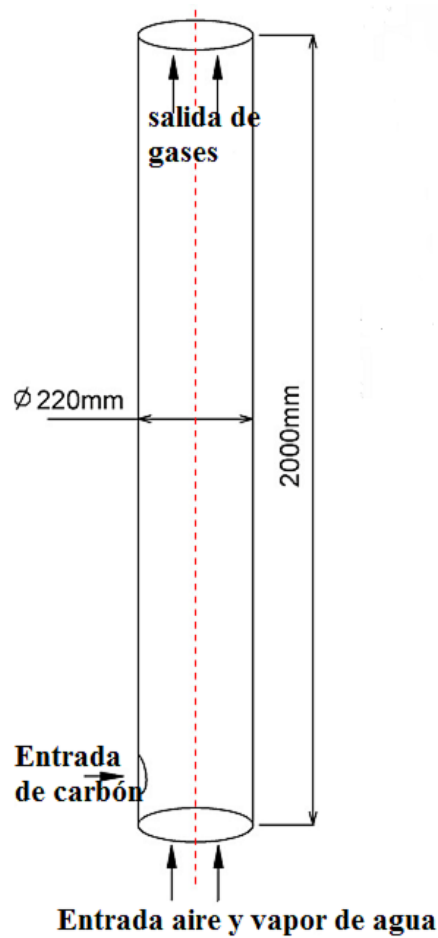


Figura 5.1 Esquema tridimensional del lecho fluido [4].

5.1.4. Consideraciones previas

En el estudio del lecho fluido se ha utilizado un modelo Euleriano-Euleriano no estático, donde el intercambio de radiación térmica entre partículas y gas se ha despreciado y entre partícula y partícula no se incluye directamente como consecuencia de la uniformidad de temperaturas de las partículas en el lecho. Se compondrá de dos fases; una fase sólida formada por el grueso de partículas que se encuentran en estado burbujeante y una fase gas formada mayoritariamente por gases y por las partículas arrastradas por el gas.

La fase gaseosa ha sido modelizada usando el modelo $k-\varepsilon$ turbulento siguiendo a Wang et al. (2009), y la fase sólida usando la teoría cinética de flujo granular.

Con intención de reducir el impacto de las características no lineales del modelo y conseguir una buena convergencia en un tiempo de computación aceptable, las características del modelo se han simplificado de la siguiente manera:

1. La sección vertical del lecho estudiado en el presente proyecto es rectangular, por lo que se asume que es bidimensional. Las fuerzas de deslizamiento con las paredes se han ignorado al igual que otras fuerzas de interacción como la fuerza browniana y la fuerza de masa virtual.

2. La intensidad de las colisiones de las partículas no varía con la temperatura, por ejemplo: Las reacciones exotérmicas o endotérmicas no tienen impacto en la fluctuación de la velocidad de los sólidos y no provocan un aumento de la temperatura granular.
3. La gasificación del carbón es un proceso endotérmico cuya temperatura es más baja que la que se da en la combustión. El calor de la gasificación debería ser suministrado. El suministro de calor se asegurará fijando una temperatura de las paredes del lecho.
4. Es razonable ignorar el efecto de la radiación por razones anteriormente citadas.
5. Las partículas son interiormente isotermas. Las partículas se han considerado esferas con la superficie lisa.

Las ecuaciones que gobiernan el movimiento son las siguientes:

5.1.5. Ecuaciones de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = S_{gs} \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) = S_{sg} \quad (5.2)$$

Donde α , \vec{v} y ρ representan la fracción volumétrica, la velocidad y la densidad mientras que los subíndices g y s representan a la fase gas o sólida, respectivamente. Cuando las ecuaciones de continuidad son usadas en reacciones heterogéneas, se dan intercambios de masa, momento y calor entre la fase sólida y la fase gas. La masa intercambiada entre las fases se expresa de la siguiente forma:

$$S_{sg} = -S_{gs} = M_c \sum \gamma_c R_c \quad (5.3)$$

Donde M_c , γ_c y R_c representan el peso molecular, el coeficiente estequiométrico y el índice de la reacción, respectivamente.

La densidad del gas es función de la composición química de las especies y de la temperatura del gas. El gas se ha considerado que tiene las propiedades de un gas ideal ligeramente compresible. La densidad viene dada por la siguiente fórmula:

$$\frac{1}{\rho_g} = \frac{RT}{p} \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{M_i} \quad (5.4)$$

La densidad de la mezcla sólida viene dada por la siguiente ecuación:

$$\rho_s = \frac{1}{\sum_{i=1}^m \frac{Y_i}{\rho_i}} \quad (5.5)$$

5.1.6. Ecuaciones de cantidad de movimiento

La ecuación de cantidad de movimiento para la fase gas es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla p_g + \alpha_g \rho_g g - \beta(\vec{v}_g - \vec{v}_s) + \nabla \cdot \alpha_g \bar{\tau}_g + S_{gs} U_s \quad (5.6)$$

Donde U_s es la velocidad principal de los sólidos, β es el coeficiente de arrastre entre la fases solida y gaseosa y $\bar{\tau}_g$ es el tensor de tensión de la fase gas, definidos mediante el modelo de Gidaspow [13], respectivamente como:

$$\beta = \begin{cases} \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \alpha_s |\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_s} \alpha_g^{-1,65} & , \quad \alpha_g > 0,8 \\ 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g d_s^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s |\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_s} & , \quad \alpha_g \leq 0,8 \end{cases} \quad (5.7)$$

$$C_D = \begin{cases} 0,44 & , \quad Re_s > 1000 \\ \frac{24}{Re_s} (1 + 0,15 Re_s^{0,687}) & , \quad Re_s \leq 1000 \end{cases} \quad (5.8)$$

$$Re_s = \frac{\rho_g \alpha_s |\vec{v}_g - \vec{v}_s| d_s}{\mu_g} \quad (5.9)$$

$$\tau_g = \mu_g |\nabla \vec{v}_g + \nabla \vec{v}_g^T| - \frac{2}{3} \mu_g (\nabla \cdot \vec{v}_g) I \quad (5.10)$$

$$\mu_g = \mu_{gl} + \mu_{gt} \quad (5.11)$$

Siendo μ_g la viscosidad de cortadura de la fase gas, μ_{gl} es la viscosidad laminar de la fase gas y μ_{gt} la viscosidad turbulenta también para la fase gas que se encuentra definida en función de k y de ε , siendo k la energía cinética turbulenta y ε la disipación turbulenta :

$$\mu_{gt} = \rho_g C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.12)$$

Donde C_μ es una constante de valor 0,09.

Las ecuaciones de transporte en función de k y ε son:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g k) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g k) = \nabla \cdot \left(\alpha_g \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k \right) + \alpha_g G_k - \alpha_g \rho_g \varepsilon \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\alpha_g \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \alpha_g \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} G_k - C_{\varepsilon 2} \rho_g \varepsilon) \quad (5.14)$$

En estas ecuaciones G_k representa la generación de turbulencia cinética debido a los gradientes de velocidades y está definida por:

$$G_k = \mu_{gt} \Delta v_g \cdot [\Delta v_g + (\Delta v_g)^T] - \frac{2}{3} \Delta v_g (\mu_{gt} \Delta v_g + \rho_g k) \quad (5.15)$$

Donde el valor de las constantes $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ y $C_{\varepsilon 2} = 1,92$. Los números de de Prandtl para k y ε son $\sigma_k = 1,0$ y $\sigma_\varepsilon = 1,3$ respectivamente.

La ecuación de la cantidad de movimiento para la fase sólida se puede escribir de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s v_s) + \nabla (\alpha_s \rho_s v_s v_s) = -\alpha_s \nabla p_s + \alpha_s \rho_s g + \beta (v_g - v_s) + \nabla \cdot \alpha_s \tau_s + S_{sg} U_s \quad (5.16)$$

Donde p_s es la presión de la fase sólida debida al choque de partículas y τ_s es el tensor de esfuerzos de la fase sólida.

Matemáticamente se puede expresar basándose en el modelo de Gidaspow:

$$p_s = \alpha_s \rho_s \Theta [1 + 2g_0 \alpha_s (1 + e)] \quad (5.17)$$

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\partial_s \rho_s \Theta) + \nabla \cdot \alpha_s \rho_s \Theta v_s = \frac{2}{3} [(-p_s I + \tau_s) : \nabla v_s + \nabla \cdot (\Gamma_\Theta \nabla \Theta) - \gamma_s + \phi_s + D_{gs}] \quad (5.19)$$

$$\gamma_s = 3(1 - e^2) \alpha_s^2 \rho_s g_0 \Theta \left(\frac{4}{d_s} \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} - \nabla \cdot v_s \right) \quad (5.20)$$

$$\phi_s = -3\beta \Theta \quad (5.21)$$

$$D_{gs} = \frac{d_s \rho_s}{4\sqrt{\pi \Theta}} \left(\frac{18\mu_g}{d_s^2 \rho_s} \right)^2 |v_g - v_s|^2 \quad (5.22)$$

$$\Gamma_\Theta = \frac{150 d_s \rho_s \sqrt{\pi \Theta}}{384(1+e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5} (1 + e) g_0 \alpha_s \right]^2 + 2\alpha_s^2 \rho_s d_s g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad (5.23)$$

$$\tau_s = \left[(-p_s + \xi_s \nabla \cdot v_s) + \mu_s [\nabla v_s + (\nabla v_s)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot v_s) I \right] \quad (5.24)$$

La viscosidad de compresión de las partículas ξ_s esta modelada siguiendo el modelo de lun et al:

$$\xi_s = \frac{4}{3} \alpha_s \rho_s d_s g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad (5.25)$$

$$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_s d_s g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} + \frac{10 \rho_s d_s \sqrt{\pi \Theta}}{96(1+e)\alpha_s g_0} \left[1 + \frac{4}{5} g_0 \alpha_s (1 + e) \right]^2 + \frac{p_s \sin \phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (5.26)$$

Donde g_0 es la función de distribución radial de la fase sólida, Θ es la temperatura granular de la partícula, γ_s es el término de disipación de la temperatura granular debido a las colisiones elásticas entre las partículas, Φ_s es el intercambio de energía cinética de fluctuación entre el gas y las partículas, D_{gs} es el ratio de disipación de energía por unidad de volumen, Γ_Θ es el coeficiente de transporte de la temperatura granular, ξ_s es la viscosidad de compresión de las partículas, es decir la asociada a cambios de volumen, μ_s es la viscosidad de cortadura de las partículas que es la viscosidad generalmente utilizada y depende de las colisiones, cinética y fricción de las partículas; ϕ es el ángulo de fricción interna e I_{2D} es el segundo invariante de la matriz de desviación de esfuerzos.

5.1.7. Ecuaciones de balance de energía

Para definir la conservación de la energía se ha utilizado un modelo euleriano, donde se definen las propiedades de cada fase por separado y despues se hacen interactuar entre ellas. La transferencia de calor en cada fase y entre ambas fases se ha tenido en cuenta mientras que la viscosidad térmica por viscosidad ha sido ignorada.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g H_g) + \nabla(\alpha_g \rho_g v_g H_g) = \nabla(\lambda_g \nabla T_g) + h_{gs}(T_g - T_s) + S_{gs} H_s \quad (5.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s H_s) + \nabla(\alpha_s \rho_s v_s H_s) = \nabla(\lambda_s \nabla T_s) + h_{sg}(T_s - T_g) + S_{sg} H_s \quad (5.28)$$

Donde H es la entalpía específica, λ es la conductividad térmica de la mezcla y h es el coeficiente de la transferencia de calor entre fases siendo $h_{gs}=h_{sg}$. Estas variables vienen definidas de la manera siguiente:

$$H = \sum_j Y_j H_j \quad (5.29)$$

$$\lambda_g = \sum_j \frac{X_j \lambda_j}{\sum_j X_j \phi_{ij}} \quad (5.30)$$

Donde λ_j es la conductividad térmica para cada especie química de la mezcla y es definida usando la teoría cinética como $\lambda_j = \mu_j (c_{p,j} + ((5/4)(R/M_j)))$, X_j es la fracción molar de cada especie y ϕ_{ij} viene definido como:

$$\phi_{ij} = \frac{[1 + (\mu_i/\mu_j)^{1/2} (M_j/M_i)^{1/4}]^2}{[8(1 + (M_i/M_j))^{1/2}]} \quad (5.31)$$

El coeficiente de la transferencia de calor entre las fases sólida y gaseosa viene definido en función del número de Nusselt, Nu_s dado por:

$$h_{sg} = \frac{6\lambda_g \alpha_g \alpha_s Nu_s}{d_s^2} \quad (5.32)$$

El número de Nusselt viene definido por:

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

$$Nu_s = (7 - 10\alpha_g + 5\alpha_g^2)(1 + 0.7Re_s^{0.2}Pr_g^{1/3}) + (1.33 - 2.4\epsilon_g + 1.2\alpha_g^2)Re_s^{0.7}Pr_g^{1/3} \quad (5.33)$$

Donde $Pr_g = \frac{\mu_g c_{p_g}}{k_g}$, es el número de Prandtl del gas.

5.1.8. Reacciones

La fase solida consiste en arena, que se ha considerado que esta formada por sílice y el residuo del carbón ya gasificado. Ambos se han considerado que estan formados por esferas de 0,62 mm de diámetro.

La fase gas la forman todos los gases procedentes de la gasificación del carbón y el aire con el vapor de agua que se utilizan para mantener las partículas del lecho en suspensión es decir, la fase gas esta formada por las siguientes especies, CO_2 , CO , O_2 , N_2 , CH_4 , H_2 y H_2O .

En el lecho tienen lugar 2 tipos de reacciones, homogéneas y heterogéneas. Las primeras tienen lugar entre las diferentes especies gaseosas y las segundas entre las especies gaseosas con el *char* que es sólido.

Otros componentes que podían estar presentes en el lecho como sulfuros o las cenizas no se han tenido en cuenta debido a que se encuentran en proporciones muy pequeñas y otras especies sí presentes en el lecho como el nitrógeno no se han tenido en cuenta en las reacciones debido a que es un elemento poco reactivo a temperaturas moderadas.

5.1.9. Pirólisis del carbón

Al realizarse la pirólisis el carbon se descompone de la siguiente manera:



En el presente proyecto se ha supuesto por sencillez una volatilización instantánea, algo que es proximo a lo que ocurre en la realidad en lechos fluidos.

5.1.10. Reacciones heterogéneas

El *char* producido en el proceso de pirólisis es consumido mediante reacciones heterogéneas de combustión y gasificación. Las reacciones heterogéneas están influidas por varios factores, por ejemplo la difusión, la rotura del *char*, la interacción entre las reacciones y el flujo turbulento.

La velocidad de la reacción del *char* se expresa:

$$r_c = \frac{6V_c k_c}{d_s} p_i \quad (5.34)$$

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

Donde V_c es el volumen de una partícula de *char*, p_i es la presión para cada uno de los reactantes del gas y k_c es una constante expresada de la siguiente forma:

$$K_c = \frac{1}{\left(\frac{1}{k_a}\right) + \left(\frac{1}{k_d}\right)} \quad (5.35)$$

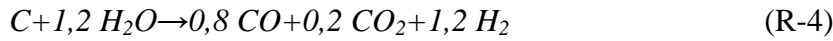
Siendo k_a el coeficiente cinético y k_d el de difusión, los cuales vienen definidos de la siguiente forma:

$$k_a = AT_s^n \exp\left(\frac{E}{RT_s}\right) \quad (5.36)$$

$$k_d = \frac{Sh D_{gs} M_c}{RT_s d_s} \quad (5.37)$$

Donde $Sh = 2 + 0,654Re^{1/2}Sc^{1/3}$ es el número de Sherwood y $D_{gs} = \frac{8,34 \times 10^{-6} T^{1,75}}{p}$ es el coeficiente de difusión del gas.

Las reacciones heterogéneas son las siguientes:



Los índices cinéticos de la reacción vienen expresados de la siguiente forma

$$K_{a,3} = 596 T_p \exp\left(\frac{-1800}{T_s}\right) \quad (5.38)$$

$$K_{a,4} = 2082,7 \exp\left(\frac{-18.036}{T_s}\right) \quad (5.39)$$

$$K_{a,5} = 63,3 \exp\left(\frac{-14.051}{T_s}\right) \quad (5.40)$$

Las unidades vienen dadas en $\text{Pa}^{-1} \text{s}^{-1}$

5.1.11 Reacciones homogéneas

Para las reacciones químicas y el efecto de turbulencia se ha tenido en cuenta el modelo de disipación de torbellinos (*Eddy dissipation*) (Eq. 5.43) y la ecuación de Arrhenius (Eq.5.42).

La velocidad de las reacciones viene expresado con la siguiente ecuación:

$$r_c = \min(r_a, r_e) \quad (5.41)$$

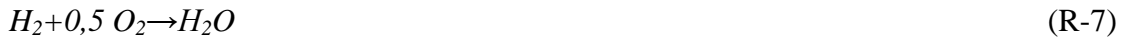
$$r_a = k_a T^z C_A^n C_b^m \quad (5.42)$$

$$r_e = v_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{K} \min\left(\min_R\left(\frac{Y_R}{v_{R,r} M_{w,R}}\right), B \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v_{j,r} M_{w,j}}\right) \quad (5.43)$$

Donde $M_{w,i}$, es el peso molecular de cada una de las especies (kg/kmol), ρ es la densidad de las mismas (kg/m³), $\nu_{R,r}$ es el coeficiente estequiométrico de los reactantes y $\nu_{P,r}$ el coeficiente estequiométrico de los productos.

Donde $k_a = A \exp(-\frac{E}{RT})$, C es la concentración del reactante, n y m son los coeficientes estequiométricos de la reacción y A y B son constantes de valores 4.0 y 0.5 respectivamente.

Las reacciones homogéneas que tienen lugar son las siguientes:



Los índices cinéticos de las reacciones vienen dados por las siguientes expresiones:

$$r_{a,6} = 1 \cdot 10^{15} \exp\left(\frac{-16.000}{T_g}\right) C_{CO} C_{O_2}^{0,5} \quad (5.44)$$

$$r_{a,7} = 5.159 \cdot 10^{15} \exp\left(\frac{-3430}{T_g}\right) T^{-1,5} C_{H_2}^{1,5} C_{O_2} \quad (5.45)$$

$$r_{a,8} = 3.552 \cdot 10^{14} \exp\left(\frac{-15.700}{T_g}\right) T^{-1} C_{CH_4} C_{O_2} \quad (5.46)$$

$$r_{a,9} = 2780 \exp\left(\frac{-1510}{T_g}\right) \left[C_{CO} C_{H_2O} - \frac{C_{CO_2} C_{H_2}}{0,0265 \exp(3968/T_g)} \right] \quad (5.47)$$

Las unidades vienen dadas en Kg m⁻³s⁻¹

5.1.12. Ecuaciones de transporte para las especies

Como se ha comentado anteriormente la fase gas está modelizada como una mezcla multicomponente que incluye, CO_2 , CO , O_2 , N_2 , CH_4 , H_2 y H_2O . La fase sólida incluye el carbón, el char y la arena.

La ecuación de conservación tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha Y_i) + \nabla(\rho \alpha Y_i v) = -\nabla \cdot \alpha J_i + R_i \quad (5.48)$$

Donde el flujo de difusión es calculado mediante:

$$J_{g,i} = -(\rho_g D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}) \nabla Y_{g,i} \quad (5.49)$$

Donde Sc_t es el número de Schmidt, que tiene un valor de 0,7 en este caso. $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión para cada especie.

5.1.13. Gastos máscicos

Para calcular los gastos máscicos se va a seguir la metodología empleada por Wang et al.(2009) [4], en la que la simulación se realizó para tres casos con diferentes gastos máscicos. Existen en la literatura consultada (Ocampo et al.)[7] información experimental sobre estos casos.

| Condiciones operación | Caso 1 | Caso 2 | Caso 3 |
|--|---------------|---------------|---------------|
| <i>Entrada de carbon(Kg/h)</i> | 8,0 | 8,0 | 8,0 |
| <i>Entrada de air(Kg/h)</i> | 19,4 | 21,9 | 28,4 |
| <i>Entrada de vapor (Kg/h)</i> | 4,6 | 4,6 | 4,6 |
| <i>Temperatura de aire y de vapor a la entrada(°C)</i> | 422 | 420 | 368 |
| <i>Temperatura del reactor (°C)</i> | 841 | 855 | 826 |

Tabla 5.1 Condiciones de operación para el lecho tridimensional

Análisis carbón

En la siguiente tabla se tiene un análisis aproximado del carbón utilizado [7]:

| Análisis aproximado(%) | |
|---|------|
| <i>humedad</i> | 2,6 |
| <i>Materia volátil</i> | 41,8 |
| <i>Residuo sólido del carbón (char)</i> | 54,1 |
| <i>ceniza</i> | 1,5 |

Tabla 5.2 Análisis aproximado del carbón

En la Tabla 5.3 se tiene un análisis más específico de la composición del carbón. Los datos están expresados en porcentaje de masa. La ceniza incluye muchos componentes minoritarios y no activos.

| Análisis elementos(%) | |
|------------------------------|------|
| <i>Carbono</i> | 75,3 |
| <i>Hidrógeno</i> | 5,4 |
| <i>Nitrógeno</i> | 1,8 |
| <i>Oxígeno</i> | 15,6 |
| <i>azufre</i> | 0,4 |
| <i>ceniza</i> | 1,5 |

Tabla 5.3 Análisis específico de la composición del carbón

5.2. MODELO FÍSICO DE LA PLANTA DE POTENCIA

La planta de potencia estará formada por el ciclo Brayton propiamente dicho y la caldera donde se queman los gases producidos.

5.2.1. Ciclo a estudio

Una vez que quedan definidas todas las condiciones de entrada y de operación del gasificador toca definir que ciclo de combustión se va a utilizar. Al estar el combustible generado en el gasificador (syngas) en forma gaseosa, un buen sistema para obtener trabajo mecánico de su energía primaria sería una turbina de gas que se base en un ciclo Brayton.

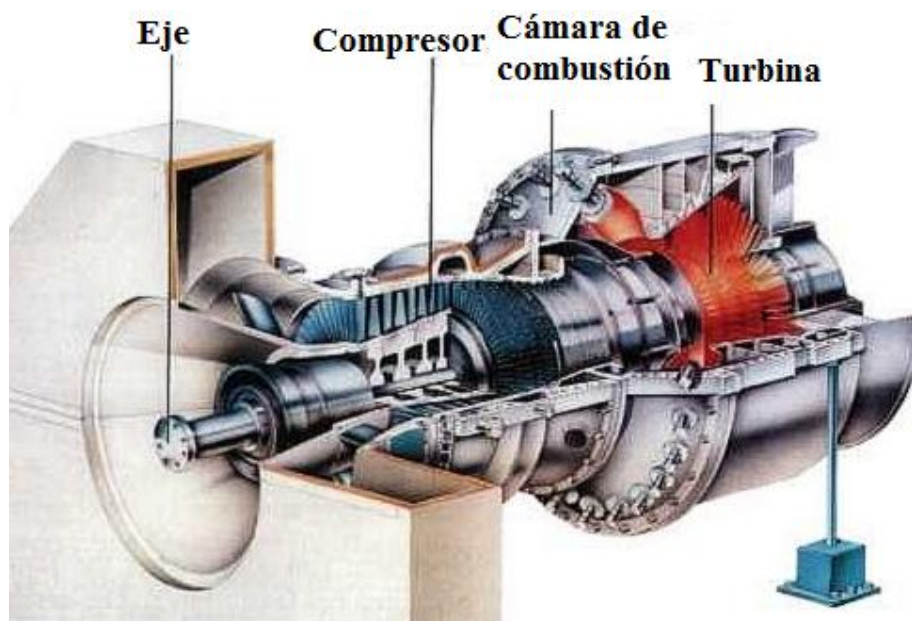


Figura 5.2. Partes de una turbina de gas industrial para producción de potencia [25].

5.2.2. Centrales de turbina de gas, ciclo Brayton simple

La turbina de gas elegida para el presente proyecto es de ciclo simple. Estos motores operan según un ciclo de compresión de aire, combustión de un combustible líquido o gaseoso, y expansión de los gases de combustión a temperatura de entrada muy elevada, hasta 1200°C. Al mismo tiempo las temperaturas de los gases a la salida de la turbina de gas son muy altas, de 500-600°C, por lo que podrían ser utilizados en otros procesos como un ciclo rankine para obtener energía. Para las unidades más modernas el rendimiento es del 35-38%.

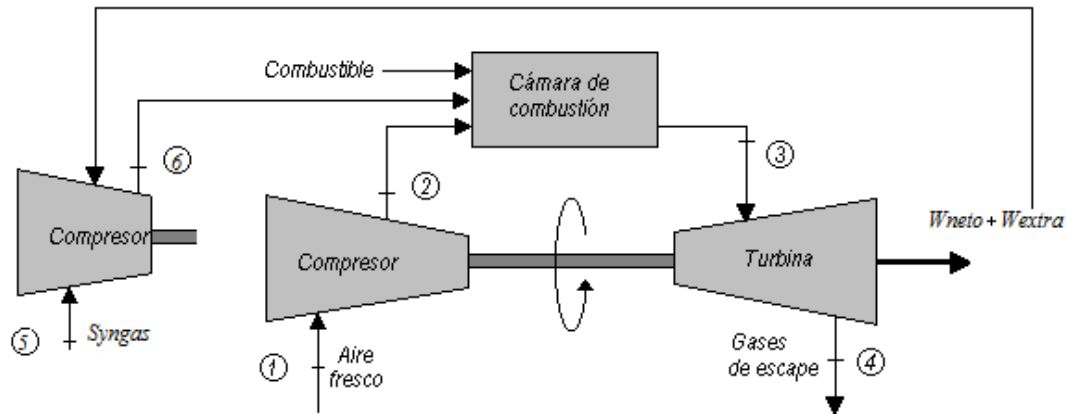


Figura 5.3. Esquema del ciclo.

El ciclo Brayton simple consta de las siguientes procesos a los que se somete aire fresco procedente del ambiente que entra a la turbina (punto 1 en la Figura 5.3)

- Compresión en un compresor.
- Combustión de los gases procedentes del gasificador en una cámara de combustión.
- Expansión de los gases en una turbina.
- Además existe un módulo de compresión de gases combustibles hasta la presión de la cámara de combustión. La potencia requerida para la compresión de dichos gases se obtiene de la turbina de gas. Dado que los gases combustibles (syngas) acrecientan el gasto másico en el estado 3 de la Figura 5.3, en la expansión del estado 3 al estado 4 se obtendrá una potencia extra. Dicha potencia extra de la turbina es la dedicada a comprimir los gases combustibles. Por consiguiente no es necesario introducir ni el ciclo de potencia de compresión ni el incremento de masa de 2 a 3.

El ciclo simplificado quedara entonces:

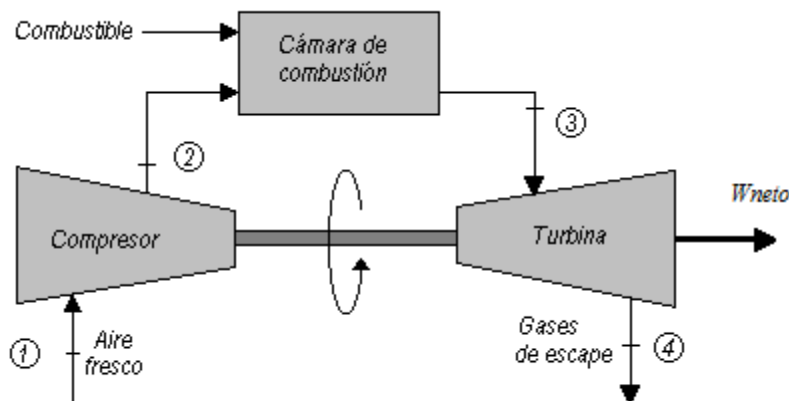


Figura 5.4. Esquema del ciclo simplificado [25].

5.2.2.1. Cámara de combustión

En la caldera es donde se queman los gases procedentes del gasificador. La potencia obtenida se calculará mediante la siguiente fórmula:

$$\dot{Q}_{gas} = (\dot{m}_H \cdot PCI_H + \dot{m}_{CH_4} \cdot PCI_{CH_4}) \cdot \eta_{comb} \quad (5.50)$$

Donde:

- \dot{Q}_{gas} , es la potencia calorífica debida a los gases procedentes del gasificador y sus unidades vienen dadas en kW.
- \dot{m}_H , es el gasto másico de hidrogeno a la salida del gasificador en kg/s.
- \dot{m}_{CH_4} , es el gasto másico de metano a la salida del gasificador en kg/s.
- PCI_H , es el poder calorífico inferior del hidrogeno: 120.011 kJ/kg.
- PCI_{CH_4} , es el poder calorífico inferior del metano: 50.010 kJ/kg.
- η_{comb} , dado que las sustancias son gaseosas se supondrá un rendimiento de la combustión alto $\eta_{comb} \approx 1$. No obstante esta suposición es preliminar y estudios posteriores a este proyecto deben profundizar en el rendimiento de la combustión en sistemas de este tipo.

5.2.2.2. Etapa de compresión

La etapa de compresión se ha modelado como un compresor de ratio 18:1, ya que se trata de una relación de compresión muy común cuando se utilizan gasificadores [24] y se ha supuesto que es adiabático y no isentrópico. El rendimiento del compresor se ha tomado igual $\eta_c=0.85$.

Las relaciones entre las temperaturas de entrada al compresor T_1 y salida del compresor T_{2i} si el compresor fuese isentrópico seguirían la siguiente relación:

$$\frac{T_{2i}}{T_1} = \Pi_c^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (5.51)$$

Donde:

- Π_c , es la relación de compresión del compresor.

$$\Pi_c = \frac{P_2}{P_1} \quad (5.52)$$

- γ , es el coeficiente adiabático o relación de calores específicos.

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (5.53)$$

Al ser un compresor no isentrópico habría que tener en cuenta el rendimiento del compresor y por lo tanto la relación entre las temperaturas de entrada y salida del compresor vendría dada por la siguiente ecuación:

$$\eta_c = \frac{T_{2i}-T_1}{T_2-T_1} \quad (5.54)$$

De este rendimiento puede obtenerse la temperatura de salida del aire del compresor:

$$T_2 = T_1 + \frac{(T_{2i}-T_1)}{\eta_c} \quad (5.55)$$

5.2.2.3. Etapa de expansión

La etapa de expansión se ha modelado como una turbina adiabática e isentrópica. El rendimiento de la turbina se ha supuesto que es $\eta_t=0.9$.

Las relaciones entre las temperaturas de entrada a la turbina T_3 salida de la turbina T_{4i} si la turbina fuese isentrópica seguirían la siguiente relación:

$$\frac{T_3}{T_{4i}} = \Pi_c^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (5.56)$$

Donde:

- Π_c , es la relación de compresión del compresor

$$\Pi_c = \frac{P_3}{P_4} \quad (5.57)$$

- γ , es el coeficiente adiabático.

Al la turbina no isentrópica habría que tener en cuenta el rendimiento de la turbina y por lo tanto la relación entre las temperaturas de entrada y salida del compresor vendría dada por la siguiente ecuación:

$$\eta_t = \frac{T_3-T_4}{T_3-T_{4i}} \quad (5.58)$$

De esta ecuación se obtiene la temperatura a la salida de la turbina:

$$T_4 = T_3 + \eta_t(T_{4i} - T_3) \quad (5.59)$$

CAPÍTULO 6. MODELO COMPUTACIONAL DEL SISTEMA DE GASIFICACIÓN UTILIZADO

6.1 Implementación en Fluent del lecho fluidizado

6.1.1. Introducción

En el desarrollo de los lechos fluidos para aplicaciones comerciales se han realizado en la comunidad internacional numerosos y costosos experimentos, sin embargo los ingenieros que acometen dichos experimentos se encuentran con dos problemas principales:

El primero es el tener que extrapolar los datos obtenidos en modelos a pequeña escala a otros de una escala mucho mayor que tengan una aplicación comercial, debido al complicado comportamiento hidrodinámico de los fluidos y a las complejas reacciones químicas que se producen dentro del lecho.

El segundo es la escasez de datos debido a que los experimentos son muy costosos y no existe suficiente información para toda la gama de tamaños de gasificadores. Por ello es tan interesante el uso de códigos de simulación como *Ansys Fluent*.

Atendiendo a estas dificultades, el objetivo del proyecto ha sido simular un gasificador de carbón en lecho fluido burbujeante mediante el código *Ansys Fluent* para distintas condiciones comprobando los datos con artículos publicados y con medidas experimentales, y ver como repercutiría en el rendimiento de una central térmica que trabajase con dicho gasificador.

6.1.2. Características de la malla y modelo utilizado en la simulación

Como se ha comentado en apartados anteriores, se ha utilizado un modelo en dos dimensiones (2D) de un lecho fluido de 2,0 m de altura y una base de 0,22 m. Para ello fue necesario realizar previamente la malla con el software *GAMBIT V.2.0* que después sería chequeada con *FLUENT*. Ver figura 6.1:



Figura 6.1. Dibujo de la malla utilizada en las simulaciones.

La malla es de cuadriláteros y está formada por 18.200 nodos los cuales están distribuidos de manera uniforme hasta una altura de 1,3 m y a partir de esa altura van aumentando progresivamente de tamaño debido a que no es necesario tanto detalle en la parte alta del lecho y así se ralentizan menos los cálculos. Como se puede observar en la figura 6.2:

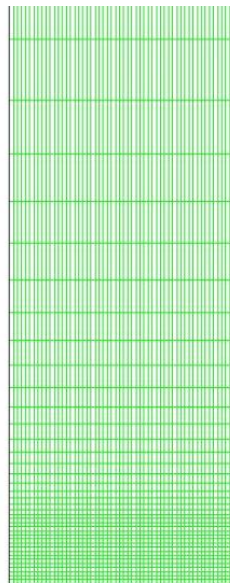


Figura 6.2. Detalle del mallado.

Sobre la malla se definieron las condiciones de contorno del problema. Las paredes laterales se han definido como superficies solidas con la condición de no deslizamiento y adiabáticas

La parte superior del lecho es una salida a presión ambiente que se ha definido como 101325 bar. La parte inferior es la entrada del aire y vapor de agua utilizada para la fluidización del lecho y se modela como una entrada de velocidad constante en el tiempo y uniforme espacialmente a definir.

La entrada lateral por la que se alimenta carbón, se encuentra a una distancia de 0,1 m por encima de la base del gasificador y mide 0,05 m de altura.

En la entrada lateral se ha considerado que el carbón se descompone en un residuo carbonoso y en elementos volátiles justo en la entrada del lecho fluido. Esto tiene sentido ya que las temperaturas que alcanza el carbón antes de entrar al lecho cuando se encuentra en el tubo de alimentación son lo suficientemente altas como para que se volatilicen algunos compuestos.

Se ha utilizado un modelo euleriano con dos fases. Una fase sólida está formada por las partículas solidas, que son la arena y el *char*. La fase gaseosa la forman todos los gases que se tienen en el lecho, es decir CO_2 , CO , O_2 , N_2 , CH_4 , H_2 y H_2O .

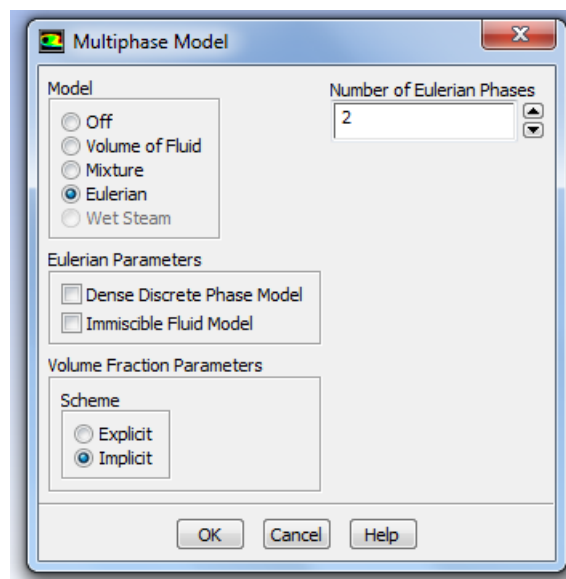


Figura 6.3. Especificación del modelo euleriano en Fluent

6.1.3. Fase sólida

La fase sólida ha sido modelada mediante la teoría cinética de flujo granular y está formada por partículas de cuarzo y de *char* de 0,62 mm de diámetro medio. La densidad de la arena es de 2700 kg/m³ y la del *char* es de 3125 kg/m³. La altura inicial del lecho antes de comenzar la fluidización es de 1 metro.

Para definir la fase sólida en *Ansys Fluent* se tiene en cuenta varios parámetros, y entre ellos están los siguientes:

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

La temperatura granular: Es la raíz cuadrática media de las fluctuaciones de velocidad de las partículas. Existen 2 modelos en *Ansys Fluent* para calcularla, la primera es basándose en las propiedades de fase en la cual *Fluent* reduce la ecuación diferencial a una ecuación algebraica convirtiendo algunos términos en constantes y la segunda es cuando *Ansys Fluent* resuelve la ecuación diferencial completa. En el proyecto a estudio se elige la segunda opción.

Diámetro: En este caso el diámetro de las partículas del lecho va a ser de 0,62 mm como se ha comentado anteriormente.

Viscosidad granular: Se refiere a la viscosidad debida a la interacción entre las partículas libres del lecho.

$$\mu = \mu_{\text{colisiones}} + \mu_{\text{cinética}} + \mu_{\text{fricción}}$$

El modelo utilizado para la resolución de la viscosidad granular es el de *Gidaspow (2003)*.

Viscosidad volumétrica granular: Representa la resistencia de las partículas a la compresión y expansión.

Se utilizará el método de resolución de *Lun et al (1984)* [14] ya que es el más utilizado.

Viscosidad debida a la fricción: Es más importante a medida que las partículas se acercan al límite de empaquetamiento que para partículas esféricas es de 0,63. Se utilizará el método de resolución de *Schaeffer* [15] .

Conductividad granular: Es la conductividad de los sólidos del lecho. En este caso se utilizará el modelo de resolución de *Gidaspow* [13].

Límite de empaquetamiento: Especifica la máxima fracción volumétrica de la fase sólida. En este caso será de 0,64.

6.1.4. Fase gas

La fase gas está formada por una mezcla de gases a los que se ha considerado incompresibles y en los que su conductividad térmica y su viscosidad varían con la temperatura y la presión siguiendo las leyes de los gases ideales.

La fase gaseosa ha sido modelada siguiendo el modelo de flujo turbulento de *k-epsilon*, que es el modelo más validado cuando se simulan flujos turbulentos y requiere únicamente que se le suministren las condiciones iniciales y de frontera.

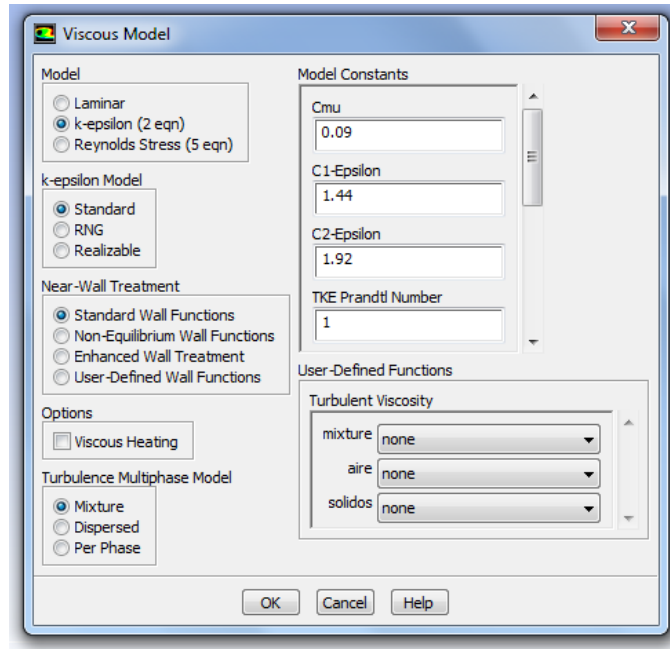


Figura 6.4. Especificación del modelo k-épsilon en Ansys Fluent.

Se ha utilizado el modelo Estándar con sus constantes correspondientes.

6.1.5. Reacciones homogéneas

Una parte muy importante del comportamiento de la fase gas son las reacciones homogéneas que se dan en ella, y como se vió en el apartado 5.1.11 son las siguientes:



Estaban basadas en la ecuación de Arrhenius y la velocidad de las reacciones venía expresada mediante la siguiente ecuación:

$$r_a = k_a T^z C_A^n C_b^m \quad (6.1)$$

Donde $k_a = A \exp(-\frac{E}{RT})$, C es la concentración del reactante, n y m son los coeficientes estequiométricos de la reacción y A y B son constantes de valores 4,0 y 0,5 respectivamente. Para la primera reacción:



Se tiene que el índice de la reacción es el siguiente:

$$r_{a,6} = 1 \cdot 10^{15} \exp\left(\frac{-16.000}{T_g}\right) C_{CO} C_{O_2}^{0,5}$$

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

En *Ansys Fluent* aparecería:

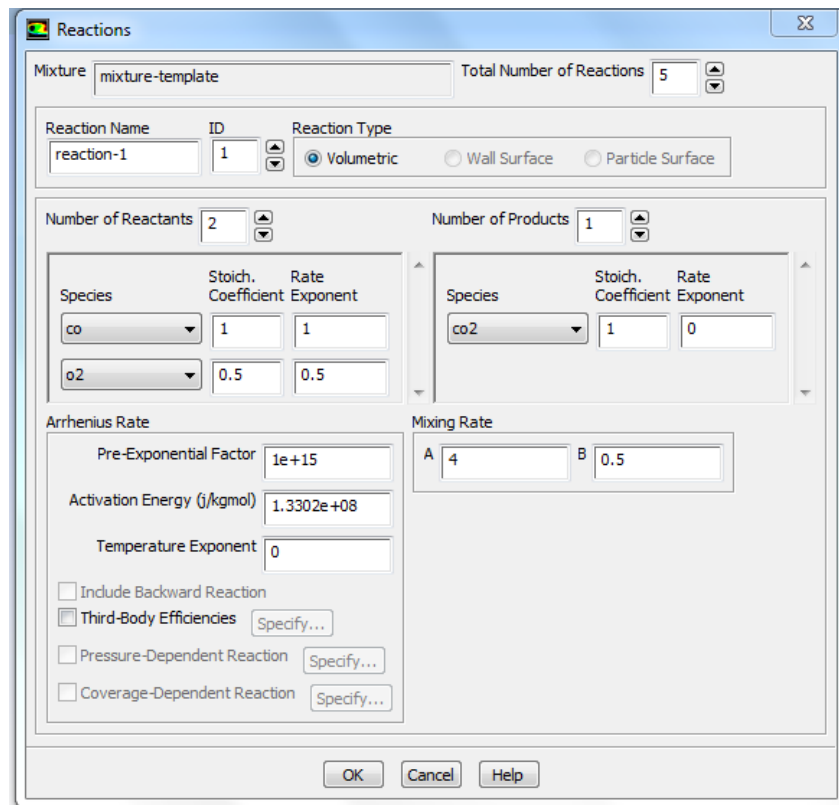


Figura 6.5. Cuadro de *Ansys Fluent* para las reacciones homogéneas.

El resto de reacciones sería similar salvo la reacción:



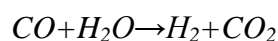
Y cuyo índice de reacción es el siguiente:

$$r_{a,9} = 2780 \exp\left(\frac{-1510}{T_g}\right) \left[C_{CO} C_{H_2O} - \frac{C_{CO_2} C_{H_2}}{0,0265 \exp(3968/T_g)} \right]$$

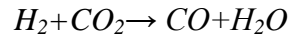
Donde se observa que existe un equilibrio y por lo tanto ambos lados de la reacción son productos y reactivos al mismo tiempo.

Para solucionar en el presente proyecto este problema se ha descompuesto la reacción en dos partes de forma que se tendrá lo indicado a continuación.

- Por un lado se tendría una reacción donde los reactivos son los elementos de la izquierda de la reacción y los productos los que se encuentran a la derecha. Es decir:



- Por otro lado habrá una reacción donde los reactivos son los elementos de la derecha y los productos los que se encuentran a la izquierda. Es decir:



Esto realmente no sería del todo exacto ya que a la hora de resolverlo, *Ansys Fluent* calcularía primero una reacción y después la otra, cuando en la realidad ocurren al mismo tiempo. Esto provoca que la cantidad de reactivos que reaccionan en la última reacción varíen ligeramente, pero como en cada iteración el tiempo que pasa es tan pequeño, la diferencia es despreciable.

6.1.6. Interacción entre fases

La fase gas y la fase sólido interactúan entre ellas y por lo tanto habrá también parámetros de los que dependa esta relación. Los más importantes son los siguientes:

Coefficiente de arrastre: Cuantifica la resistencia de las partículas a ser movidas por el fluido. Depende de la fricción superficial y de la forma de las partículas del lecho que en este caso son esferas de cuarzo.

Se utilizará el método de resolución de *Gidaspow (2003)*.

Coefficiente de restitución elástico: Indica lo elásticos que son los choques entre las partículas dentro de la fase sólida, siendo igual a 1 cuando estos son totalmente elásticos y 0 cuando son totalmente inelásticos.

Se ha elegido un coeficiente de restitución igual a 0.9 como valor típico de un lecho formado por partículas de arena y *char*.

Coefficiente de transmisión de calor: Solo está activo cuando se tiene activada la ecuación de la energía y por lo tanto existen reacciones en el lecho.

6.1.7. Reacciones heterogéneas:

Es posiblemente una de las partes más importantes ya que su influencia sobre los resultados es enorme. En este proyecto se tenía las siguientes reacciones heterogéneas:



Los índices cinéticos de la reacción vienen expresados de la siguiente forma(Wang et al.2009):

$$K_{a,3} = 596 T_p \exp \left(\frac{-1800}{T_s} \right)$$

$$K_{a,4} = 2082,7 \exp \left(\frac{-18.036}{T_s} \right)$$

$$K_{a,5} = 63,3 \exp \left(\frac{-14.051}{T_s} \right)$$

Las unidades vienen dadas en $\text{Pa}^{-1}\text{s}^{-1}$

A diferencia del caso anterior donde *Ansys Fluent* permite introducir los parámetros y los índices de la reacción directamente ya que como vimos tiene una ventana donde se van introduciendo los datos, en el caso de las reacciones heterogéneas la única forma de definirla es mediante una función definida por el usuario (UDF).

Las UDF son programas escritos en código de programación como *C++* o *Fortran*, y que *Ansys Fluent* es capaz de interpretar. Se utilizan, además de para definir las reacciones heterogéneas, en los casos en los que se necesita definir de una manera más concreta algún parámetro de nuestro programa.

Para definir la UDF con las reacciones heterogéneas se han seguido los siguientes pasos:

1. Se ha incluido un archivo de cabecera *udf.h*, donde vienen definidas muchas de las funciones y parámetros que utiliza *Ansys Fluent* por defecto. De esta forma existe una manera unívoca de denominar a la densidad, la temperatura, presión, etc.
2. Se han definido las constantes que se van a utilizar. Algunas de estas constantes son el peso molecular de los gases, la constante universal de los gases, la energía de activación de las reacciones y la constante de Arrhenius como se puede ver en la figura 6.6.

```
#include "udf.h"

static const real Arrhenius1 = 596;
static const real E_Activation1 = 1800;
static const real Arrhenius2 = 2082.7;
static const real E_Activation2 = 18036;
static const real Arrhenius3 = 63.3;
static const real E_Activation3 = 14051;
static const real PMc=12;
#define SMALL_S 1.e-29

#define MAX_SPE_EQNS_SEC 2 /*total number of species in secondary phase*/
#define index_evap_secondary 0 /*evaporating species index in secondary phase*/
#define sec_index 0 /*index of secondary phase*/
#define P_OPER 101325 /*operating pressure equal to GUI value*/
#define Ru 8.314
```

Figura 6.6. Detalle del programa utilizado donde se definen algunas constantes.

3. Se definen las reacciones que se van a usar mediante la expresión: `DEFINE_HET_RXN_RATE` y a continuación entre paréntesis y separadas por comas el nombre de la reacción heterogénea que se está programando y las

variables que se van a utilizar como son los índices de las celdas de nuestra malla.

4. Se definen los índices que indican en que celdilla de la malla estamos, si se trata de un sólido o un gas, o la especie a la que se refiere la reacción.
5. Se define la temperatura para la fase primaria (gas) y la fase secundaria (sólidos) como se aprecia en la figura 6.7.

```
DEFINE_HET_RXN_RATE(arrhl,c,t,hr,mw,yi,rr,rr_t)
{
    Domain **domain_reactant = hr->domain_reactant;
    real *stoich_reactant = hr->stoich_reactant;
    int *reactant = hr->reactant;
    int i;
    int sp_id;
    int dindex;
    Thread *t_reactant;
    real ci,Ppi;

    Thread **pt = THREAD_SUB_THREADS(t);
    Thread *tp = pt[0];
    Thread *ts = pt[1];

    real T_prim = C_T(c,tp); /*primary phase temperature*/
    real T_sec = C_T(c,ts); /*secondary phase temperature*/
    real diam=0.00062;
```

Figura 6.7. Detalle del programa utilizado

6. Haciendo uso de los operadores *if* y *endif*, se calculan los índices cinéticos k_a y de difusión k_d de cada reacción.
7. Finalmente se obtiene el índice para cada reacción heterogénea que es lo que se requiere como variable de salida del programa.

Una vez programada la *udf* es preciso compilarla y cargarla como función en *Ansys Fluent*.

6.1.8. Condiciones de contorno de entrada

6.1.8.1. Introducción

Para definir las condiciones de contorno de entrada de gases o partículas se utilizará un paralelismo con los datos de Xiaofang Wang, Baoshen Jin y Wenqi Zhong (2009) para así poder tener una referencia a la hora de comparar los resultados de la simulación.

Estos autores utilizaron un gasificador tridimensional (3D) con las medidas especificadas en la figura 6.8.

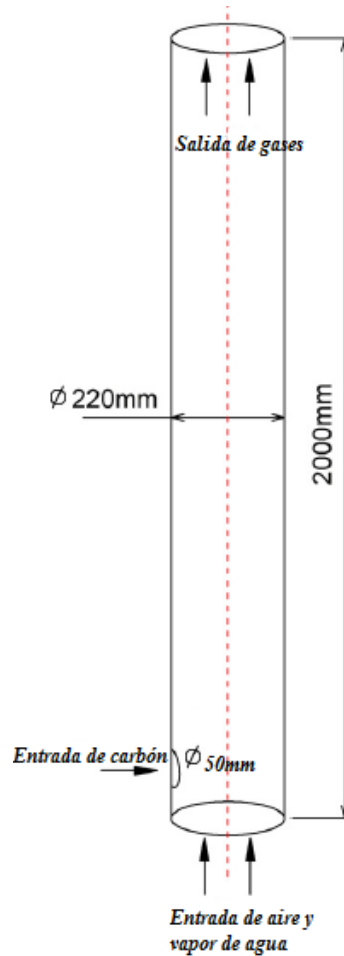


Figura 6.8. Dibujo del gasificador estudiado por Wang et al.(2009).

Este modelo se ha transformado en el presente proyecto a dos dimensiones. En concreto se utilizan las siguientes condiciones de operación para tres casos diferentes según se ha comentado anteriormente:

Repetición de la tabla 5.1:

| Condiciones operación | <i>Caso I</i> | <i>Caso II</i> | <i>Caso III</i> |
|--|---------------|----------------|-----------------|
| <i>Entrada de carbón(Kg/h)</i> | 8,0 | 8,0 | 8,0 |
| <i>Entrada de aire(Kg/h)</i> | 19,4 | 21,9 | 28,4 |
| <i>Entrada de vapor (Kg/h)</i> | 4,6 | 4,6 | 4,6 |
| <i>Temperatura de aire y de vapor a la entrada(°C)</i> | 422 | 420 | 368 |
| <i>Temperatura del reactor (°C)</i> | 841 | 855 | 826 |

El carbón utilizado por Wang et al.(2009) tiene la siguiente composición:

| Análisis aproximado(% en masa) | |
|---|------|
| <i>humedad</i> | 2,6 |
| <i>Materia volátil</i> | 41,8 |
| <i>Residuo sólido del carbón (char)</i> | 54,1 |
| <i>ceniza</i> | 1,5 |

Tabla 5.2. Análisis aproximado en porcentaje de masa del carbón utilizado.

En la siguiente tabla tenemos un análisis más específico de la composición del carbón:

| <i>Análisis elementos(% en masa)</i> | |
|--------------------------------------|------|
| <i>Carbono</i> | 75,3 |
| <i>Hidrogeno</i> | 5,4 |
| <i>Nitrogeno</i> | 1,8 |
| <i>Oxigeno</i> | 15,6 |
| <i>azufre</i> | 0,4 |
| <i>ceniza</i> | 1,5 |

Tabla 5.3. Análisis de los elementos del carbón en porcentaje de masa.

Con estos análisis de composición se ha de definir las condiciones de contorno de la simulación 2D a abordar en el presente proyecto. En *Ansys Fluent* se necesita conocer la temperatura, la fracción molar de cada componente y la velocidad de entrada para poder definir las condiciones de contorno.

La velocidad de entrada se puede calcular con la siguiente fórmula:

$$\vec{V} = \frac{\dot{m}}{\rho_T A} \quad (6.1)$$

Donde:

- \dot{m} , es el caudal másico que entra en kg/s
- ρ_T , es la suma de las densidades parciales de los componentes de entrada suponiendo que están mezclados y comparten la misma temperatura. Sus unidades son kg/m³.
- A , es el área de la sección entrada en m².

El primer problema que se encuentra es que los datos de las tablas anteriores son 3D, mientras que en nuestro proyecto la simulación se realiza en 2 dimensiones.

Para poder comparar los resultados de Wang et al.(2009) y los del modelo 2D del presente proyecto ambos estudios deben referirse a lechos equivalentes. Para que los lechos sean equivalentes ha de cumplirse que:

- Tengan la misma velocidad superficial, así la velocidad de fluidización es la misma.

$$\vec{V}_{inf}(3D) = \vec{V}_{inf}(2D) \quad (6.2)$$

- La proporción entre gases de fluidización y combustible a gasificar debe ser similar. De esta forma nos aseguramos que la proporción de masa que entra por el lateral en relación a la que entra por la parte inferior se mantenga en una región central del lecho donde ocurren las reacciones.

$$\psi \cdot \frac{\dot{m}_{gases\ lateral}}{\dot{m}_{gases\ inferior}}(3D) = \frac{\dot{m}_{gases\ lateral}}{\dot{m}_{gases\ inferior}}(2D) \quad (6.3)$$

Siendo:

- \vec{V}_{inf} , la velocidad de los gases que se introducen en el lecho por la parte inferior.
- \dot{m}_{gases} , el caudal en kg/s de los gases que son introducidos.
- ψ , Coeficiente de mezclado tridimensional. Es difícil de conocer y depende del área de apertura lateral del lecho 3D. Wang et al. No proporciona el área. A peor mezclado (área lateral más reducida) más bajo es ψ . Arbitrariamente se escoge $\psi = 0,5$. No obstante futuros desarrollos en la temática del proyecto deben estudiar el valor de ψ .

El siguiente problema es que a priori no se conoce que cantidad de moles de cada una de las sustancias va a entrar en el lecho, y dichos números de moles se necesitan como parámetros de entrada a la simulación.

6.1.8.2. Entrada inferior

Por la parte inferior del gasificador entran los gases que van permitir la fluidización del lecho y que son el nitrógeno y el oxígeno del aire más el vapor de agua.

Con las condiciones de operación de la tabla 5.1 se puede calcular cual es la fracción molar de cada una de estas sustancias.

Así se tiene:

$$X_{O_2} = \frac{\dot{n}_{O_2}}{\dot{n}_{O_2} + \dot{n}_{N_2} + \dot{n}_{H_2O}} \quad (6.4)$$

$$X_{N_2} = \frac{\dot{n}_{N_2}}{\dot{n}_{O_2} + \dot{n}_{N_2} + \dot{n}_{H_2O}} \quad (6.5)$$

$$X_{H_2O} = \frac{\dot{n}_{H_2O}}{\dot{n}_{O_2} + \dot{n}_{N_2} + \dot{n}_{H_2O}} \quad (6.6)$$

Donde el número de moles de cada componente sería:

$$\dot{n}_{O_2} = \frac{\dot{m}_{O_2}}{PM_{O_2}} = \frac{\dot{m}_{aire} * 0,21}{0,032} \quad (6.7)$$

$$\dot{n}_{N_2} = \frac{\dot{m}_{N_2}}{PM_{N_2}} = \frac{\dot{m}_{aire} * 0,79}{0,028} \quad (6.8)$$

$$\dot{n}_{H_2O} = \frac{\dot{m}_{H_2O}}{PM_{H_2O}} = \frac{4,6}{0,018} \quad (6.9)$$

Siendo:

- PM , el peso molecular de cada componente en kg/mol.
- \dot{m}_{aire} , el caudal de aire en kg/h.

La tabla 6.1 muestra los resultados obtenidos para la fracción másica.

| Fracción molar | Caso I | Caso II | Caso III |
|----------------|--------|---------|----------|
| X_{O_2} | 0,137 | 0,1413 | 0,15 |
| X_{N_2} | 0,588 | 0,6075 | 0,6445 |
| X_{H_2O} | 0,275 | 0,2512 | 0,2056 |

Tabla 6.1. Fracciones molares en la entrada inferior.

Una vez que se ha calculado la fracción molar se tiene que calcular la velocidad con la que entran los gases, la cual viene dada por la siguiente expresión:

$$\vec{V}_{inf} = \frac{\dot{m}_{inf}}{\rho_T A_{inf}} \quad (6.10)$$

Donde:

- \dot{m}_{inf} , es el gasto de gas que entra y viene dado en kg/s. Sería la suma del gasto de aire con el de vapor que aparece en la tabla 6.2, es decir:

$$\dot{m}_{inf} = \frac{\dot{m}_{aire} + \dot{m}_{H_2O}}{3600} \quad (6.11)$$

| | CasoI | CasoII | CasoIII |
|-----------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| \dot{m}_{inf} | $6,67 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{s}$ | $7,36 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{s}$ | $9,17 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{s}$ |

Tabla 6.2. Caudal total introducido por la entrada inferior.

- A_{inf} , es el área de entrada de la base del lecho (distribuidor) y viene dado por la siguiente expresión:

$$A_{inf} = \frac{\pi D_{inf}^2}{4} = \frac{\pi}{4} (0,22)^2 = 0,038 \text{ m}^2 \quad (6.12)$$

Donde D_{inf} , es el diámetro de entrada en metros.

- ρ_T , es la suma de las densidades parciales de los gases y viene dado en kg/m^3 .

La densidad de cada uno de los gases sería:

$$\rho = \frac{X P_T}{\frac{R}{P_M} T_g} \quad (6.13)$$

Donde:

- X , es la fracción molar de cada uno de los gases.
- P_T , es la presión total a la entrada y vendrá estimada por la siguiente ecuación:

$$P_T = \rho_{solidos} \alpha_s H g + P_{atm} \quad (6.14)$$

Donde el primer término es la presión debida al peso del lecho y depende de la densidad de los sólidos $\rho_{solidos}$, la altura del lecho H , la gravedad g y de una constante α_s que es igual a la fracción volumétrica ocupada por los sólidos. Se ha escogido tanto la altura H

como la fracción de sólidos correspondientes a las condiciones iniciales de lecho estático.

El segundo término es la presión atmosférica. Sustituyendo:

$$P_T = 2700 \cdot (1 - 0,48) \cdot 1 \cdot 9,8 + 101325 = 115084 \text{ Pa} \sim 1,15 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

- R , es la constante universal de los gases y su valor es 8,314 J/mol.K
- PM , es el peso molecular en kg/mol.
- T_g , es la temperatura de los gases a la entrada en K.

Tendríamos para cada gas entonces:

$$\rho_{O_2} = \frac{X_{O_2} P_T}{\frac{R}{PM_{O_2}} T_g} = \frac{X_{O_2} \cdot 1,15 \cdot 10^5}{\frac{8,314}{0,032} \cdot T_g}$$

$$\rho_{H_2O} = \frac{X_{H_2O} P_T}{\frac{R}{PM_{H_2O}} T_g} = \frac{X_{H_2O} \cdot 1,15 \cdot 10^5}{\frac{8,314}{0,018} \cdot T_g}$$

$$\rho_{N_2} = \frac{X_{N_2} P_T}{\frac{R}{PM_{N_2}} T_g} = \frac{X_{N_2} \cdot 1,15 \cdot 10^5}{\frac{8,314}{0,028} \cdot T_g}$$

| Densidad (kg/m ³) | Caso I | Caso II | Caso III |
|-------------------------------|--------|---------|----------|
| ρ_{O_2} | 0,087 | 0,09025 | 0,10358 |
| ρ_{H_2O} | 0,099 | 0,09025 | 0,07984 |
| ρ_{N_2} | 0,328 | 0,3395 | 0,3894 |

Tabla 6.3. Densidad parcial de cada compuesto en la entrada inferior del lecho.

Con los valores de las densidades de los gases a la entrada ya se puede calcular la velocidad de entrada V_{inf} para el primer caso.

$$\vec{V}_{inf}(3D) = \frac{\dot{m}_{inf}}{\rho_T A_{inf}} = \frac{\frac{\dot{m}_{aire} + \dot{m}_{H_2O}}{3600}}{(\rho_{O_2} + \rho_{H_2O} + \rho_{N_2}) * 0,038} = 0,342 \frac{m}{s}$$

Como comentamos al principio en el modelo propuesto se tiene que cumplir:

$$\vec{V}_{inf}(3D) = \vec{V}_{inf}(2D) = 0,342 \frac{m}{s}$$

| Velocidad entrada | Caso I | Caso II | Caso III |
|---------------------|---------------------|----------------------|---------------------|
| $\vec{V}_{inf}(2D)$ | $0,342 \frac{m}{s}$ | $0,3725 \frac{m}{s}$ | $0,421 \frac{m}{s}$ |

Tabla 6.4. Velocidad de entrada de los gases por la parte inferior del gasificador.

6.1.8.3. Entrada lateral

El caudal de carbón que se introduce por la entrada lateral es de 8 kg/h y tiene la siguiente composición (Wang et al. y Ocampo et al.):

| <i>Análisis aproximado(% en masa)</i> | |
|---|------|
| <i>humedad</i> | 2,6 |
| <i>Materia volátil</i> | 41,8 |
| <i>Residuo sólido del carbón (char)</i> | 54,1 |
| <i>ceniza</i> | 1,5 |

En *Ansys Fluent* se introducen los datos de las condiciones de contorno para cada fase por separado, es decir, en una pestaña del programa se aportan las fracciones molares de sólidos que entran con su velocidad y en otra las fracciones molares de gases con la velocidad de entrada de estos.

Como ya se ha comentado anteriormente en el presente proyecto se ha supuesto que el carbón antes de entrar en el lecho se descompone en gases y char principalmente debido a las altas temperaturas que se alcanzan en el conducto de alimentación por la proximidad al lecho y nada más entrar a él. Por lo que en la simulación del lecho no entra carbón directamente si no el char y los gases volatilizados.

De los 8 kg/h que se introducen a la entrada es preciso calcular qué cantidad corresponde a la fase sólida y cuanta a la fase gas. En la fase sólida estarán el *char* y las cenizas mientras que en la fase gas la humedad y los volátiles.

$$\dot{m}_{gases\ lateral} = (0,418 + 0,026) \cdot 8 \frac{kg}{h} = 3,552 \frac{kg}{h}$$

$$\dot{m}_{sólidos\ lateral} = (0,541 + 0,015) \cdot 8 \frac{kg}{h} = 4,448 \frac{kg}{h}$$

Conocer los caudales será útil para conocer las velocidades de entrada para cada una de las fases, pero además se necesita conocer las fracciones molares de cada componente para definir perfectamente las condiciones de contorno de *Ansys Fluent*.

Para ello se necesita un análisis más preciso de los elementos que componen el carbón que se utilizará y son los que aparecen en la tabla 5.3. Con los datos de las tablas es posible calcular el número de moles de cada sustancia, así se tendrá:

$$\dot{m}_{carbón} = 8 \frac{kg}{h}$$

$$Carbón \rightarrow n_0 char + volátiles + n_5 H_2O + cenizas$$

$$volátiles \rightarrow n_1 CO_2 + n_2 CO + n_3 CH_4 + n_4 H_2$$

El nitrógeno procedente del carbón no se ha tenido en cuenta en los cálculos debido a que se trata de un porcentaje muy pequeño del carbón utilizado. Además dentro del lecho queda completamente anulado por el nitrógeno procedente del aire que se introduce por la parte inferior.

Las cenizas tampoco se han tenido en cuenta en los cálculos debido a que se trata de un porcentaje muy pequeño, además su composición exacta es difícil de determinar aunque se sabe que están formadas mayoritariamente por carbono muy inactivo que no intervendrá en las reacciones. La aportación de carbono debido a las cenizas es irrelevante en relación a la aportada por el *char* ya que este último es el producto mayoritario después de la pirolisis del carbón.

El contenido en azufre del carbón estudiado en este proyecto es todavía mucho más minoritario que el nitrógeno y las cenizas, y su peso en las reacciones energéticas que se dan dentro del gasificador muy pequeño debido a que es absorbido inmediatamente por la caliza que se encuentra junto con la arena del lecho.

Para resolver el sistema se igualará la masa que se tiene de cada elemento antes de la pirolisis, debido a que se conoce la composición del carbón con la masa que se tiene después de la pirolisis, esta última expresada multiplicando los moles por el peso molecular de cada elemento. De esta forma y conociendo que:

$$\dot{m}_{\text{carbón}} = 8 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

Carbono

$$\dot{m}_{\text{carbono}} = 0,753 \cdot \dot{m}_{\text{carbón}}$$

$$PM_c = 0,012 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}$$

$$\dot{m}_{\text{carbono}} = 0,753 \cdot \frac{8}{3600} = PM_c(n_0 + n_1 + n_2 + n_3)$$

Hidrógeno

$$\dot{m}_{\text{hidrógeno}} = 0,054 \cdot \dot{m}_{\text{carbón}}$$

$$PM_H = 0,012 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}$$

$$\dot{m}_{\text{hidrógeno}} = 0,054 \cdot \frac{8}{3600} = PM_H(4n_3 + 2n_4 + 2n_5)$$

Oxígeno

$$\dot{m}_{\text{oxígeno}} = 0,156 \cdot \dot{m}_{\text{carbón}}$$

$$PM_{O_2} = 0,032 \frac{kg}{mol}$$

$$m_{\text{oxígeno}} = 0,156 \cdot \frac{8}{3600} = PM_{O_2} (2n_1 + n_2 + n_5)$$

Vapor de agua

$$\dot{m}_{H_2O} = 0,026 \cdot \dot{m}_{\text{carbón}}$$

$$PM_{H_2O} = 0,018 \frac{kg}{mol}$$

$$\dot{m}_{H_2O} = 0,026 \cdot \frac{8}{3600} = PM_{H_2O} \cdot n_5$$

Char

$$\dot{m}_{\text{char}} = 0,541 \cdot \dot{m}_{\text{carbón}}$$

$$PM_{\text{char}} = 0,012 \frac{kg}{mol}$$

$$\dot{m}_{\text{char}} = 0,541 \cdot \frac{8}{3600} = PM_{\text{char}} \cdot n_0$$

Materia volátil

$$\dot{m}_{\text{volátiles}} = 0,418 \cdot \dot{m}_{\text{carbón}}$$

$$PM_{CO_2} = 0,044 \frac{kg}{mol}$$

$$PM_{CO} = 0,028 \frac{kg}{mol}$$

$$PM_{CH_4} = 0,016 \frac{kg}{mol}$$

$$PM_{H_2} = 0,002 \frac{kg}{mol}$$

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

$$\dot{m}_{volátiles} = 0,418 \cdot \frac{8}{3600} = PM_{CO_2} n_1 + PM_{CO} n_2 + PM_{CH_4} n_3 + PM_{H_2} n_4$$

Se han conseguido 6 ecuaciones con 6 incógnitas por lo que es posible despejar las incógnitas y obtener el número de moles de cada especie. De esta forma se obtiene:

Sólidos

$$Char: n_0 = 9,952 \cdot 10^{-2} \text{ moles}$$

Gases

$$CO_2: n_1 = 5,581 \cdot 10^{-3} \text{ moles}$$

$$CO: n_2 = 8,313 \cdot 10^{-3} \text{ moles}$$

$$CH_4: n_3 = 2,67 \cdot 10^{-2} \text{ moles}$$

$$H_2: n_4 = 7,82 \cdot 10^{-3} \text{ moles}$$

$$H_2O: n_5 = 2,77 \cdot 10^{-3} \text{ moles}$$

Para calcular las fracciones molares de las especies gaseosas hay que conocer su sumatorio:

$$\sum n_{gases} = 5,1184 \cdot 10^{-2} \text{ moles}$$

Las fracciones molares de los gases procedentes de la pirolisis del carbón serán las siguientes:

$$CO_2: X_{CO_2} = 0,109$$

$$CO: X_{CO} = 0,162$$

$$CH_4: X_{CH_4} = 0,522$$

$$H_2: X_{H_2} = 0,153$$

$$H_2O: X_{H_2O} = 0,054$$

6.1.8.4. Cálculo velocidad lateral (Fase gas)

Para poder calcular la velocidad de los gases que entran por el orificio lateral se tiene que tener en cuenta que los datos de que se disponen para poder comparar nuestros resultados pertenecen a un lecho en 3D (Wang et al, 2009), mientras que el lecho del presente proyecto se simulará en dos dimensiones.

Para obtener la velocidad a la que entran los gases hay que calcular la suma de las densidades parciales de los gases procedentes de la pirolisis del carbón pero para ello es necesario conocer antes la presión que existe en la entrada lateral:

$$P_T = \rho_{sólidos} \alpha_s \tilde{H} g + P_{atm}$$

Donde el primer término es la presión debida al peso del lecho y depende de la densidad de los sólidos $\rho_{sólidos}$, la altura que existe desde el centro de la entrada lateral hasta la superficie del lecho \tilde{H} , la gravedad g y de una constante α_s que es igual a la fracción volumétrica ocupada por los sólidos.

El único término que varía con respecto a los cálculos de presión realizados para la entrada anterior es la altura del lecho que pasa a ser 0,85 m.

El segundo término es la presión atmosférica. Sustituyendo:

$$P_T = 2700 \cdot (1 - 0,48) \cdot 0,85 \cdot 9,8 + 101325 = 113025 \text{ Pa}$$

La temperatura en la entrada lateral es un valor desconocido a priori y que se ha supuesto que es de 800 K. Es un valor aproximado pero realista porque es una temperatura a la que se ha realizado la pirolisis completa del carbón y por lo tanto se han desprendido los volátiles pero todavía inferior a la que pueda aparecer dentro del lecho donde ya se están produciendo todas las reacciones de gasificación y combustión parcial del gasificado.

Así se tendrán las siguientes densidades para los productos volátiles:

$$\rho_{CO_2} = \frac{X_{CO_2} P_T}{\frac{R}{PM_{CO_2}} T_g} = 0,082 \frac{kg}{m^3}$$

$$\rho_{CH_4} = \frac{X_{CH_4} P_T}{\frac{R}{PM_{CH_4}} T_g} = 0,142 \frac{kg}{m^3}$$

$$\rho_{CO} = \frac{X_{CO} P_T}{\frac{R}{PM_{CO}} T_g} = 0,077 \frac{kg}{m^3}$$

$$\rho_{H_2O} = \frac{X_{H_2O} P_T}{\frac{R}{PM_{H_2O}} T_g} = 0,017 \frac{kg}{m^3}$$

$$\rho_{H_2} = \frac{X_{H_2} P_T}{\frac{R}{PM_{H_2}} T_g} = 5,192 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{m^3}$$

Por lo tanto la suma de las densidades será $\rho_L = 0,323 \text{ kg/m}^3$.

Para conocer la velocidad de los gases por la entrada lateral es necesario conocer también su caudal másico. Este lo podemos despejar de la relación dada por la ecuación (6.3)

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.

$$\dot{m}_{gases\ lateral}(2D) = \dot{m}_{gases\ inferior}(2D) \cdot \psi \cdot \frac{\dot{m}_{gases\ lateral}}{\dot{m}_{gases\ inferior}}(3D) \quad (6.15)$$

Para lo cual también es necesario conocer también el caudal de gases que se introducen por la base del lecho en dos dimensiones. El caudal de gases que se introducen por la base en 2-D se puede despejar de las siguientes ecuaciones:

$$\dot{m}_{gases\ inferior\ 3D} = \vec{V}_{inf} \cdot A_{3D} \cdot \rho_T \quad (6.16)$$

$$\dot{m}_{gases\ inferior\ 2D} = \vec{V}_{inf} \cdot A_{2D} \cdot \rho_T \quad (6.17)$$

La velocidad inferior y la densidad total son iguales en los dos casos, mientras que las áreas serían:

$$A_{3D} = 0,038\ m^2$$

$$A_{2D} = 0,22\ m^2$$

Despejando:

$$\dot{m}_{gases\ inferior\ 2D} = \dot{m}_{gases\ inferior\ 3D} \cdot \frac{A_{2D}}{A_{3D}} \quad (6.18)$$

Se tendrían los siguientes gastos másicos en dos dimensiones:

| | <i>Caso I</i> | <i>Caso II</i> | <i>Caso III</i> |
|---------------------------------|---------------|----------------|-----------------|
| $\dot{m}_{gases\ inferior\ 2D}$ | 0,0386 kg/s | 0,0426 kg/s | 0,053 kg/s |

Tabla 6.5. Gastos másicos para los diferentes casos que se introducen por la base del gasificador.

Al sustituir en (6.16)

$$\dot{m}_{gases\ lateral}(2D) = 2,86 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{s}$$

Será igual para todos los casos ya que el gasto másico en la entrada lateral es el mismo.

La velocidad de los gases por la entrada lateral venía dada por la siguiente fórmula:

$$\vec{V}_{gases\ lateral\ 2D} = \frac{\dot{m}_{gases\ lateral\ 2D}}{\alpha_{gas\ lateral} \cdot \rho_L A_{lateral\ 2D}}$$

Donde $\alpha_{gas\ lateral}$ es la fracción volumétrica de los gases en la entrada lateral. Con los datos de la tabla 5.2 se tiene $\alpha_{gas\ lateral}=0,556$.

Sustituyendo finalmente obtendremos la velocidad de los gases por la entrada lateral:

$$\vec{V}_{gases\ lateral\ 2D} = 0,318 \frac{m}{s}$$

Esta velocidad será la misma para los 3 casos que vamos a estudiar pues el caudal de carbón es el mismo.

6.1.8.5. Cálculo velocidad lateral (Fase sólidos)

Para los sólidos que entran por la apertura lateral tendremos el siguiente gasto másico en el modelo bidimensional.

$$\dot{m}_{sólidos\ lateral}(2D) = \dot{m}_{gases\ inferior}(2D) \cdot \psi \cdot \frac{\dot{m}_{sólidos\ lateral}(3D)}{\dot{m}_{gases\ inferior}(3D)} \quad (6.19)$$

Utilizando los datos de cualquier caso, por ejemplo los del primero:

$$\dot{m}_{sólidos\ lateral\ 3D} = 4,448 \frac{kg}{h}$$

$$\dot{m}_{gases\ inferior\ 3D} = 24 \frac{kg}{h}$$

$$\dot{m}_{gases\ inferior\ 2D} = 138,95 \frac{kg}{h}$$

Por lo tanto despejando tendremos:

$$\dot{m}_{sólidos\ lateral\ 2D} = 12,87 \frac{kg}{h} = 3,577 \cdot 10^{-3} kg/s$$

La velocidad de los sólidos a la entrada vendrá dada por la siguiente ecuación:

$$\vec{V}_{sólidos\ lateral\ 2D} = \frac{\dot{m}_{sólidos\ lateral\ 2D}}{\alpha_{sólidos\ lateral} \cdot \rho_{sólidos} \cdot A_{lateral\ 2D}} = 6 \cdot 10^{-5} m/s \quad (6.20)$$

Donde $\alpha_{sólidos\ lateral}$ es la fracción volumétrica de los sólidos en la entrada lateral. Con los datos de la tabla 5.2 se tiene $\alpha_{sólidos\ lateral} = 0,444$.

Esta velocidad será la misma para los 3 casos que vamos a estudiar pues el caudal de carbón es el mismo.

6.1.8.6. Cálculo de la cantidad de carbón para el caso bidimensional

Para calcular los rendimientos de la planta de potencia es necesario conocer el caudal de carbón para el caso bidimensional.

Utilizaremos la misma equivalencia que se ha utilizado hasta ahora.

$$\psi \cdot \frac{\dot{m}_{sólidos\ lateral\ 3D}}{\dot{m}_{gases\ inferior\ 3D}} = \frac{\dot{m}_{sólidos\ lateral\ 2D}}{\dot{m}_{gases\ inferior\ 2D}}$$

Utilizando los datos de cualquier caso, por ejemplo los del primero:

$$\dot{m}_{carbón\ 3D} = 8 \frac{kg}{h}$$

$$\dot{m}_{gases\ inferior\ 3D} = 24 \frac{kg}{h}$$

$$\dot{m}_{\text{gases inferior } 2D} = 138,95 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

El caudal de carbón para el caso bidimensional sería:

$$\dot{m}_{\text{carbón } 2D} = 23,16 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

6.2. IMPLEMENTACIÓN EN CYCLEPAD DEL CICLO DE POTENCIA

El ciclo se va a simular en el presente proyecto es el siguiente:

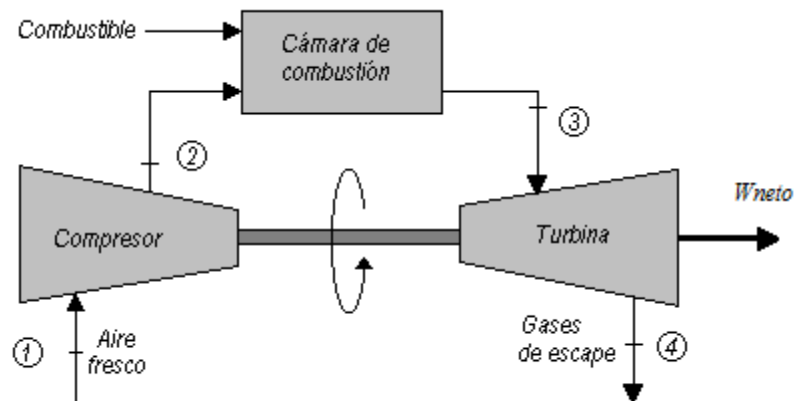


Figura 5.4. Esquema del ciclo

Que consta de los siguientes procesos:

- Compresión en un compresor.
- Combustión de los gases procedentes del gasificador en una cámara de combustión.
- Expansión de los gases en una turbina.

Para poder simularlo se utilizará el programa software de simulación termodinámica desarrollado por la Northwestern University [27]. El esquema del ciclo en Cyclepad sería el siguiente:

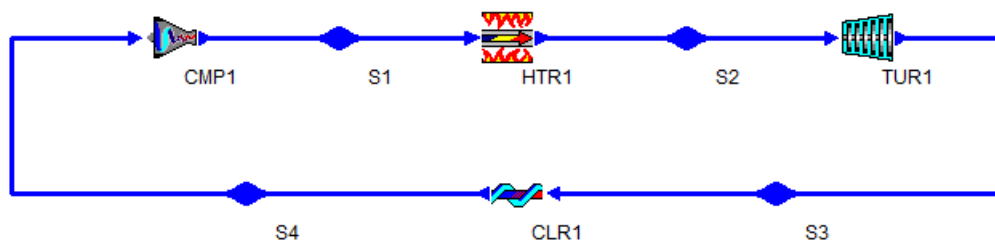


Figura Esquema del ciclo de potencia en CYCLEPAD

Donde:

| <i>Elementos</i> | |
|------------------|------------------------------|
| <i>CMP1</i> | <i>Compresor</i> |
| <i>HTR1</i> | <i>Caldera de combustión</i> |
| <i>TUR1</i> | <i>Turbina</i> |
| <i>CLR1</i> | <i>Renovación de aire</i> |

Tabla 6.6. Elementos del Ciclo en Cyclepad.

Etapas de compresión

La etapa de compresión quedaría definida de la siguiente forma:

| | |
|---|---|
| Substance: AIR | Substance: AIR |
| Phase: GAS | Phase: GAS |
| T = 288.1 K | T = 723.3 K |
| P = 100.0 kPa | P = 1,800 kPa |
| v = 0.8261 m³/kg | v = 0.1152 m³/kg |
| u = 206.5 kJ/kg | u = 518.4 kJ/kg |
| h = 289.1 kJ/kg | h = 725.8 kJ/kg |
| s = 2.38 kJ/kgK | s = 2.48 kJ/kgK |
| m-dot = 0.0743 kg/s | m-dot = 0.0743 kg/s |
| V-dot = 0.0614 m³/sec | V-dot = 0.0086 m³/sec |
| U-dot = 15.34 kW | U-dot = 38.52 kW |
| H-dot = 21.48 kW | H-dot = 53.93 kW |
| S-dot = 0.1770 kW/K | S-dot = 0.1840 kW/K |
| flow fraction = 1.0000[0-1] | flow fraction = 1.0000[0-1] |

a) Entrada (S4)

b) Salida (S1)

```

Modeled as: ADIABATIC
Modeled as: not ISENTROPIC
Modeled as: Make Assumption
q = 0 kJ/kg
Tout-s = 658.1 K
delta-P = 1,700 kPa
delta h = 436.7 kJ/kg
delta hs = 371.2 kJ/kg
delta-s = 0.0949 kJ/kgK
m-dot = 0.0743 kg/s
delta H = 32.44 kJ
h-out-s = 660.3 kJ/kg
Shaft Power = -32.44 kW
Q-dot = 0 kW
PR = 18.00
eta-s = 85.00%
flow fraction = 1.0000[0-1]
r = 7.17
spec shaft-work = -436.7 kJ/kg
spec work-s = -371.2 kJ/kg

```

c) Compresor (CMP1)

Figura 6.9. Etapa de compresión.

Los valores en verde son las variables a modificar mientras que los valores en azul son los calculados directamente por Cyclepad y variarán en función de los casos estudiados.

Etapa de expansión

| | |
|------------------------------------|------------------------------------|
| Substance: AIR | Substance: AIR |
| Phase: GAS | Phase: GAS |
| T = 1,500 K | T = 741.1 K |
| P = 1,800 kPa | P = 100.0 kPa |
| v = 0.2389 m ³ /kg | v = 2.12 m ³ /kg |
| u = 1,075 kJ/kg | u = 531.2 kJ/kg |
| h = 1,505 kJ/kg | h = 743.7 kJ/kg |
| s = 3.21 kJ/kgK | s = 3.33 kJ/kgK |
| m-dot = 0.0743 kg/s | m-dot = 0.0743 kg/s |
| V-dot = 0.0178 m ³ /sec | V-dot = 0.1579 m ³ /sec |
| U-dot = 79.88 kW | U-dot = 39.47 kW |
| H-dot = 111.8 kW | H-dot = 55.25 kW |
| S-dot = 0.2384 kW/K | S-dot = 0.2474 kW/K |
| flow fraction = 1.0000[0-1] | flow fraction = 1.0000[0-1] |

a) Entrada (S2)

b) Salida (S3)

```

Modeled as: not ISENTROPIC
Modeled as: ADIABATIC
Modeled as: Make Assumption
q = 0 kJ/kg
Tout-s = 656.8 K
delta-P = -1,700 kPa
delta h = -761.5 kJ/kg
delta hs = -846.1 kJ/kg
delta-s = 0.1212 kJ/kgK
m-dot = 0.0743 kg/s
h-out-s = 659.1 kJ/kg
Shaft Power = 56.57 kW
Q-dot = 0 kW
PR = 18.00
eta-s = 90.00%
flow fraction = 1.0000[0-1]
spec shaft-work = 761.5 kJ/kg
spec work-s = 846.1 kJ/kg

```

c) Turbina (TUR1)

Figura 6.10. Etapa de expansión.

La temperatura a la entrada de la turbina se ha supuesto 1500 K , aunque se podría haber elegido otra temperatura. Hay que remarcar que las suposiciones que se realizan con Cyclepad sirven para realizar una aproximación y su finalidad no es describir con meticulosidad el comportamiento del ciclo.

Etapa de combustión

```
Modeled as: not ISOCHORIC
Modeled as: ISOBARIC
q = 779.3 kJ/kg
delta-P = 0 kPa
delta h = 779.3 kJ/kg
delta-s = 0.7318 kJ/kgK
m-dot = 0.0743 kg/s
Q-dot = 57.90 kW
flow fraction = 1.0000[0-1]
```

Figura 6.11. Etapa de combustión.

La cámara de combustión se modela como isobárica y la variable a definir sería la potencia calorífica que venía dada por la siguiente ecuación:

$$\dot{Q}_{gas} = (\dot{m}_H \cdot PCI_H + \dot{m}_{CH_4} \cdot PCI_{CH_4}) \cdot \eta_{comb}$$

Esta potencia será diferente en función de los casos estudiados pues depende de los gastos másicos de hidrógeno y metano producidos en el gasificador simulado en *Ansys Fluent*.

CAPÍTULO 7. RESULTADOS DEL PROYECTO

7.1. Introducción

En esta parte del proyecto se analizarán los datos obtenidos en las simulaciones de los casos estudiados, se compararán los datos con los obtenidos en otros trabajos y se verá su integración en un ciclo de potencia.

7.2. Simulación de la gasificación

En esta parte del proyecto se verán los datos obtenidos más relevantes de los 3 casos de gasificación del capítulo anterior tras ser simulados en *Ansys Fluent*. Resultan especialmente interesantes los mapas de fracción volumétrica, que permiten conocer como burbujea el lecho y los diagramas de las especies, donde es posible observar cómo se distribuyen las especies del lecho y conocer cuál es el ritmo de producción de las reacciones. También es interesante conocer qué temperaturas se alcanzan en el lecho y cuál es su distribución, así como los diagramas de velocidades.

Se analizarán también algunas simulaciones previas a los casos principales cuya finalidad era eliminar las causas de posible divergencia. La mayoría de los gráficos serán estadísticos y por lo tanto representarán valores medios que se han producido a lo largo del tiempo, aunque en algunos casos serán imágenes del lecho en un momento determinado. También se analizarán diagramas de dispersión para conocer la fortaleza de los datos obtenidos.

7.3. Simulaciones previas a los 3 casos estudiados

No se pueden introducir todas las condiciones de contorno y de operación de los casos estudiados en *Ansys Fluent* sin que este diverja. Para evitar esto hay que realizar sucesivas simulaciones cada vez más complejas hasta que se alcanzan las condiciones necesarias para simular de forma completa los casos estudiados. La secuencia de dichas simulaciones se describe en la tabla 7.1.

| Figura | Reacciones desactivadas / Entrada lateral cerrada |
|---------------|---|
| 7.1 | Diagrama fracción volumétrica de sólidos $t=0$ |
| 7.2 | Diagrama presiones estáticas $t=0.1$ |
| 7.3 | Secuencia formación burbujas. Velocidad inferior $=0.421\text{m/s}$, Temperatura $=300\text{ K}$ |
| 7.4 a) | Diagrama de fases. Velocidad inferior $=0.342\text{ m/s}$, Temperatura $=300\text{ K}$ |
| 7.4 b) | Diagrama de fases. Velocidad inferior $=0.342\text{ m/s}$, Temperatura $=695\text{ K}$ |
| | Reacciones desactivadas/ Entrada lateral abierta |
| 7.5 a) | Secuencia de imágenes de la concentración molar de carbón con el paso del tiempo |
| 7.5 b) | Secuencia de imágenes de la concentración molar de CO_2 con el paso del tiempo. |
| | Reacciones activadas/ Entrada lateral abierta |
| 7.6 | Momento anterior y posterior de activar las reacciones. |
| 7.7 | Detalle de una burbuja antes y después de activar las reacciones. |

Tabla 7.1. Listado de las imágenes previas a los casos principales.

7.4. Simulaciones con las reacciones desactivadas

Las primeras simulaciones fueron realizadas en lecho frío donde sólo se introducían gases por la parte inferior del lecho, manteniéndose la entrada lateral cerrada.

7.4.1. Simulaciones con las reacciones desactivadas. Entrada lateral cerrada

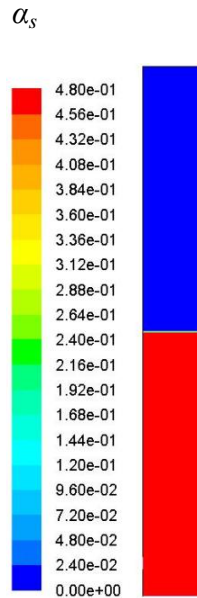


Figura 7.1. Mapa de Fracción volumétrica de sólidos en el momento inicial ($t=0$).

La figura 7.1 es el mapa de la fracción volumétrica de sólidos en el momento inicial ($t=0$), en el que se diferencian perfectamente la fase sólida de la fase gas. En concreto las partículas del lecho se encuentran en reposo ocupando un metro de altura (altura de lecho fijo) con fracción volumétrica igual a $\alpha_s=0,48$.

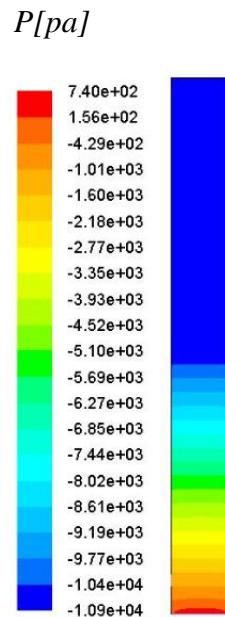


Figura 7.2. Distribución de presiones estáticas para $t=0,1s$.

En la figura 7.2 se aprecian los contornos de la presión estática en los momentos iniciales de la fluidización, donde se pueden ver que son decrecientes a medida que aumenta la altura. La siguiente secuencia de imágenes (figura 7.3) corresponde a un lecho fluido desde que se comienza a introducir gases por su parte inferior, en este caso una mezcla de aire y vapor de agua, hasta que se encuentra burbujeando. La velocidad por la parte inferior es de 0,421 m/s y la temperatura es de 300K.

α_s

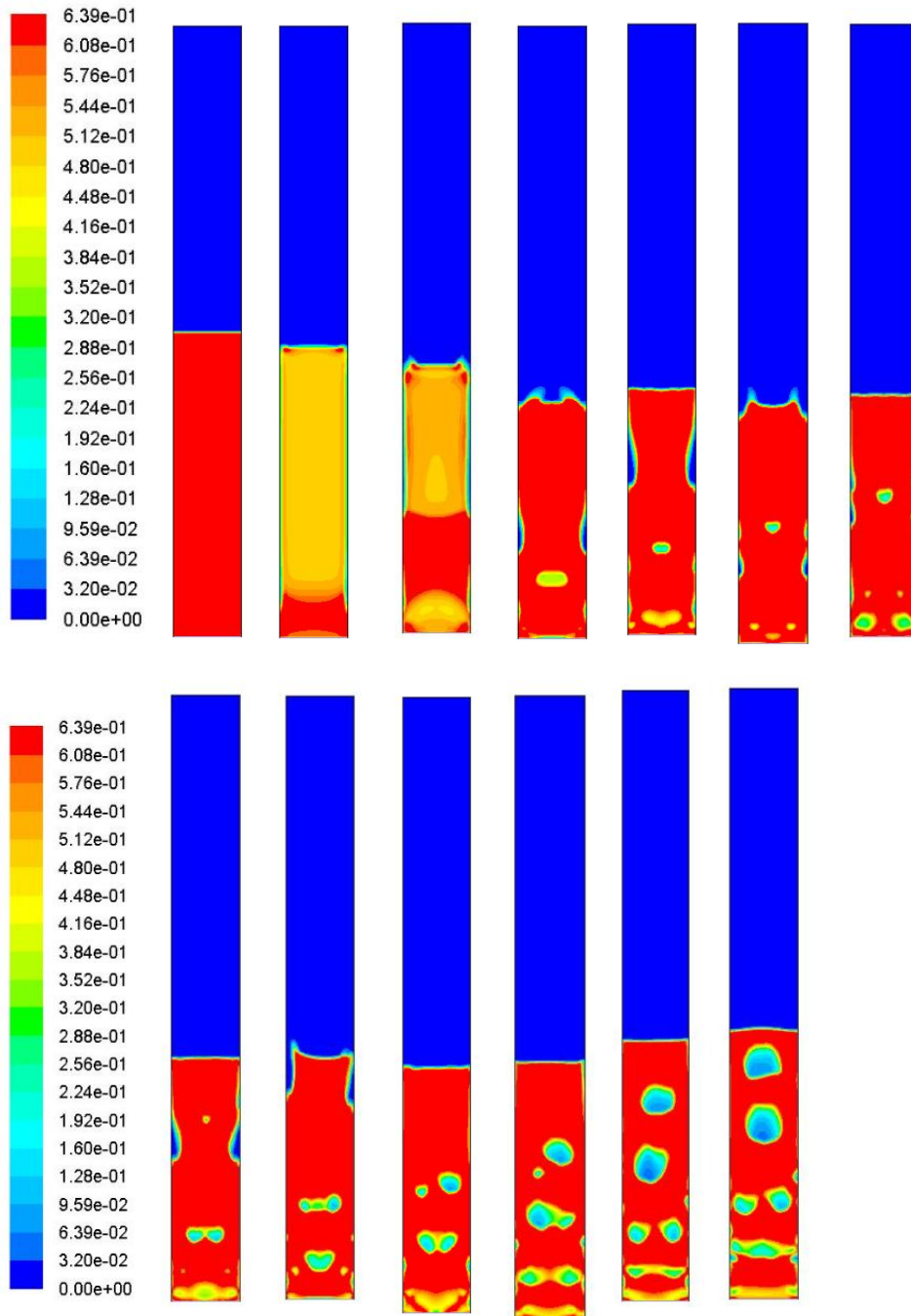


Figura 7.3. Secuencia de imágenes con un intervalo de tiempo entre ellas de 0,2s de la fracción volumétrica de sólidos desde el momento inicial hasta 2,4s. Velocidad de entrada 0,421 m/s y temperatura de 300 K.

La temperatura de los gases entrantes tiene un impacto muy fuerte en la capacidad de burbujear del lecho como se puede ver en la figura 7.4.

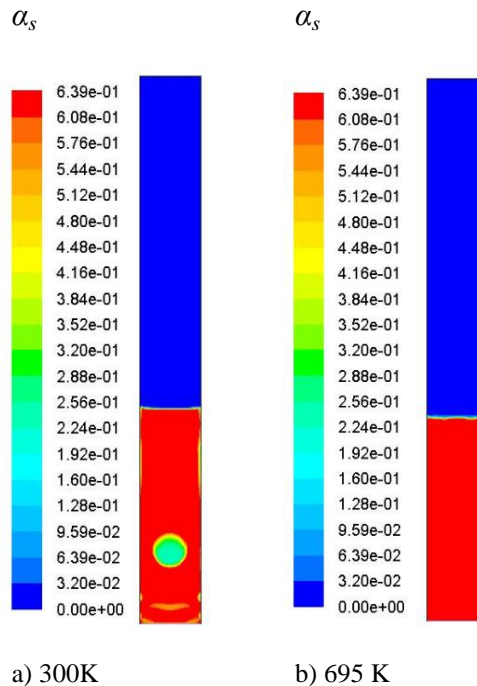


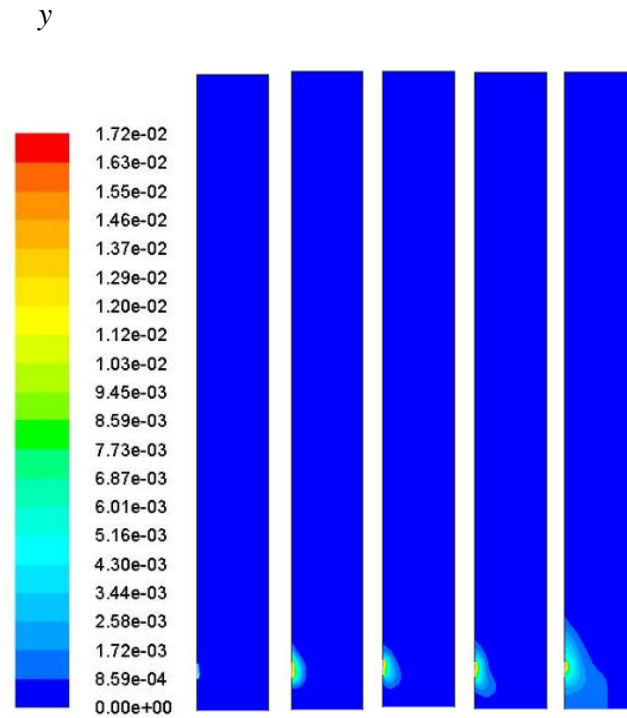
Figura 7.4 Imágenes de la fracción volumétrica de sólidos con velocidad de entrada inferior al gasificador de 0,342 m/s y temperaturas de los gases; a) 300K, b) 695K

Se observa que en el caso 7.4. a) el lecho burbujea con facilidad mientras que en el 7.4.b) se encuentra en estado de mínima fluidización. Se debe a que un aumento de la temperatura del gas de entrada conlleva una disminución de la densidad y por lo tanto la cantidad de masa y de cantidad de movimiento del gas introducido es menor.

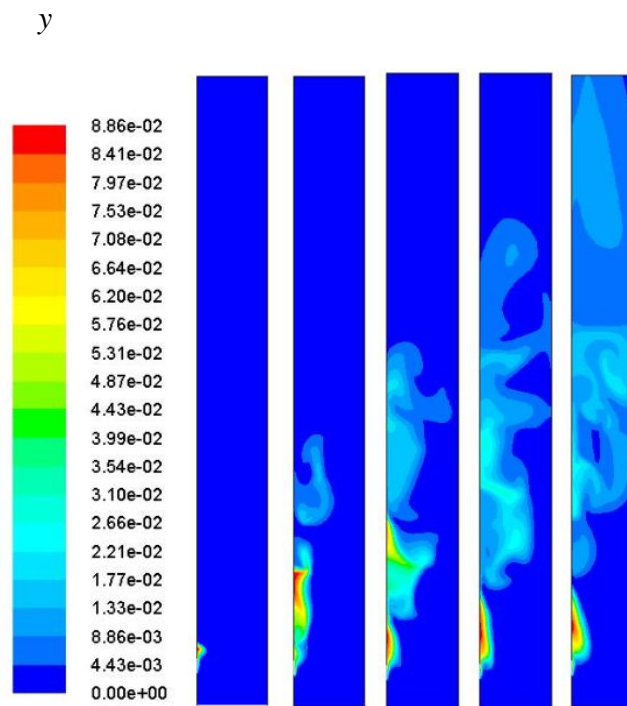
Este hecho es importante porque las condiciones son similares a las que se dan en el caso I a falta de introducir los gases por la compuerta lateral y de activar las reacciones. Si el lecho no burbujea es muy probable que diverja al activar las reacciones y se provoque un gran aumento de la temperatura debido a que al no burbujear el lecho, este pierde gran capacidad de poder distribuir el calor dentro de él favoreciendo que se alcancen picos muy altos de temperatura en algunos puntos.

7.4.2. Simulaciones con las reacciones desactivadas. Entrada lateral abierta

El siguiente paso es introducir gases y carbón por la entrada lateral. La forma en la que se distribuyen los sólidos y los gases dentro del lecho es completamente diferente como se puede observar en la figura 7.5.



a)



b)

Figura 7.5. Concentración molar en la entrada lateral, a) de char, b) de un gas, en este caso CO_2 .

En la figura 7.5. a) los sólidos se distribuyen de una manera casi homogénea por el lecho debido a que la densidad del *char* y de la arena son similares, mientras que los gases inmediatamente tienden a ascender ya que su densidad es mucho menor como se aprecia en la figura 7.5. b).

7.5. Simulaciones con las reacciones activadas

Una vez que el lecho esta burbujeando y su comportamiento es estable se pasa a ir activando las reacciones una a una comenzando por las homogéneas y activando en último lugar las heterogéneas. Al activar las reacciones, el lecho se desestabiliza ligeramente debido al calor producido por ellas, creando un aumento de presión. Esto se aprecia en la figura 7.6. En la figura 7.7. se tiene una burbuja en ese instante :

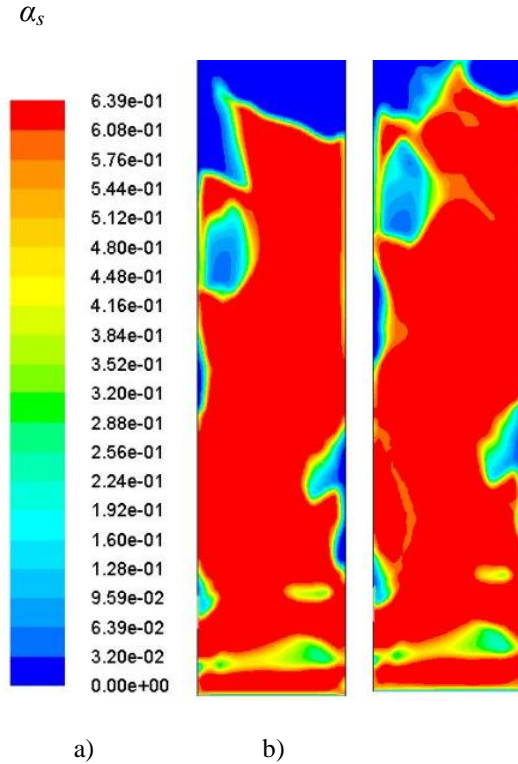


Figura 7.6. Fracción volumétrica de sólidos un momento antes a) y después b) de activar las reacciones en el gasificador($V_{inf}=0,421$ m/s, $t=14,8$ s).

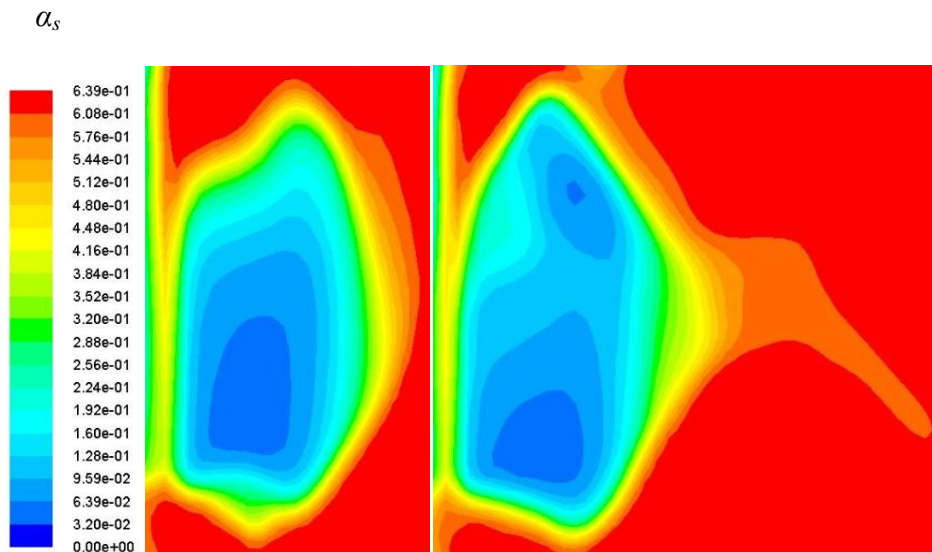


Figura 7.7. Detalle burbuja ($V_{inf}=0,421$ m/s, $t=14,8$ s).

7.6. Casos estudiados

A partir de este momento analizaremos los casos propiamente dichos. Para resolver los casos se han aplicado ecuaciones de segundo orden y el paso de tiempo utilizado ha sido $\Delta t = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}$.

7.6.1. Caso I

Las condiciones para el caso I se resumen a continuación una vez realizado el ajuste a 2 dimensiones descrito en el capítulo 6:

| Condiciones operación | Caso I |
|---|-------------------|
| <i>Temperatura de aire y de vapor a la entrada(K)</i> | 695 |
| <i>Temperatura entrada lateral (K)</i> | 800 |
| <i>Temperatura del reactor (K)</i> | 1114 |
| Entrada inferior | |
| <i>Velocidad entrada (m/s)</i> | 0,342 |
| <i>Fracción molar O_2</i> | 0,137 |
| <i>Fracción molar H_2O</i> | 0,275 |
| <i>Fracción molar N_2</i> | 0,588 |
| Entrada lateral | |
| <i>Velocidad entrada gases (m/s)</i> | 0,318 |
| <i>Velocidad entrada char (m/s)</i> | $6 \cdot 10^{-5}$ |
| <i>Fracción molar CO_2</i> | 0,109 |
| <i>Fracción molar H_2O</i> | 0,054 |
| <i>Fracción molar CH_4</i> | 0,522 |
| <i>Fracción molar CO</i> | 0,162 |
| <i>Fracción molar H_2</i> | 0,153 |

Tabla 7.2. Datos para el caso I.

Con estas condiciones el lecho no consigue burbujear y acaba divergiendo. El diagrama de la fracción volumétrica del lecho un poco antes de que divergiese es el que se muestra en la figura 7.8.

Solo se aprecia cierto burbujeo en la pared izquierda debido a los gases procedentes de la pirolisis del carbón. Estos gases son insuficientes para que el lecho alcance un régimen burbujeante, comportándose como si estuviese en un estado de mínima fluidización. Al activar las reacciones se produce un aumento de la temperatura en el lecho y éste al no estar burbujeando no es capaz de redistribuir la temperatura correctamente, siendo esta la causa de la divergencia.

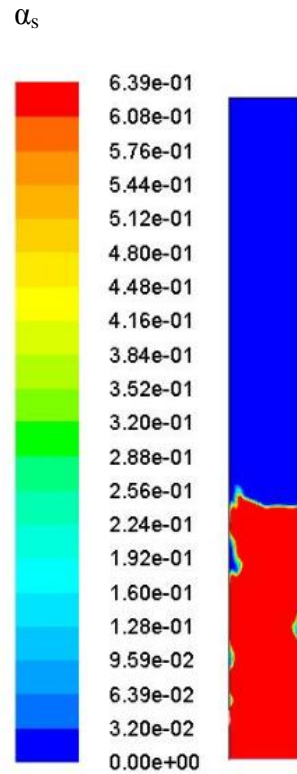


Figura 7.8. Mapa instantáneo de fracción volumétrica de sólidos en el caso I ($t=15$ s)

En el artículo utilizado como referencia (Wang et al.) donde se realizaba la simulación en 3 dimensiones sí que existía burbujeo en todo el volumen del lecho fluido como se aprecia en la siguiente imagen.

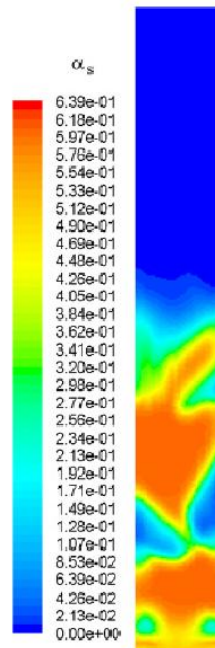


Figura 7.9. Mapa instantáneo de la fracción volumétrica de sólidos reportada por Wang et al. para el caso I ($t=8.25$ s) [4].

La simulación realizada es incapaz de replicar con total precisión las condiciones que se dan en un lecho tridimensional, ya que la geometría es distinta. En un modelo tridimensional el fluido interactúa con las paredes en diferentes direcciones creando un aumento de la turbulencia en el lecho y esto puede favorecer la formación de burbujas.

También es posible que en las simulaciones realizadas en los artículos (Wang et al, 2009) y (A. Ocampo et al, 2003) se haya utilizado algún parámetro del que no se ha dejado constancia y cuyo efecto sea relevante. Por ejemplo el coeficiente de restitución elástico se ha tomado en el presente proyecto igual a 0,9 que es un valor típico para la arena, pero en (Wang et al ,2009) no se declara su valor. Un decrecimiento del coeficiente de restitución provoca que las partículas del lecho se comporten de forma menos elástica y puede favorecer la formación de burbujas.

7.6.2. Caso II

Las condiciones para el caso II eran una vez hecho el ajuste a 2 dimensiones:

| Condiciones operación | Caso II |
|---|-------------------|
| <i>Temperatura de aire y de vapor a la entrada(K)</i> | 693 |
| <i>Temperatura entrada lateral (K)</i> | 800 |
| <i>Temperatura del reactor (K)</i> | 1128 |
| Entrada inferior | |
| <i>Velocidad entrada (m/s)</i> | 0,3725 |
| <i>Fracción molar O₂</i> | 0,1413 |
| <i>Fracción molar H₂O</i> | 0,2512 |
| <i>Fracción molar N₂</i> | 0,6075 |
| Entrada lateral | |
| <i>Velocidad entrada gases (m/s)</i> | 0,318 |
| <i>Velocidad entrada char (m/s)</i> | $6 \cdot 10^{-5}$ |
| <i>Fracción molar CO₂</i> | 0,109 |
| <i>Fracción molar H₂O</i> | 0,054 |
| <i>Fracción molar CH₄</i> | 0,522 |
| <i>Fracción molar CO</i> | 0,162 |
| <i>Fracción molar H₂</i> | 0,153 |

Tabla 7.3. Datos utilizados en la simulación del caso II.

7.6.2.1. Patrón de flujo

La formación de burbujas se puede observar en el mapa de fracción volumétrica de sólidos de la figura 7.10.

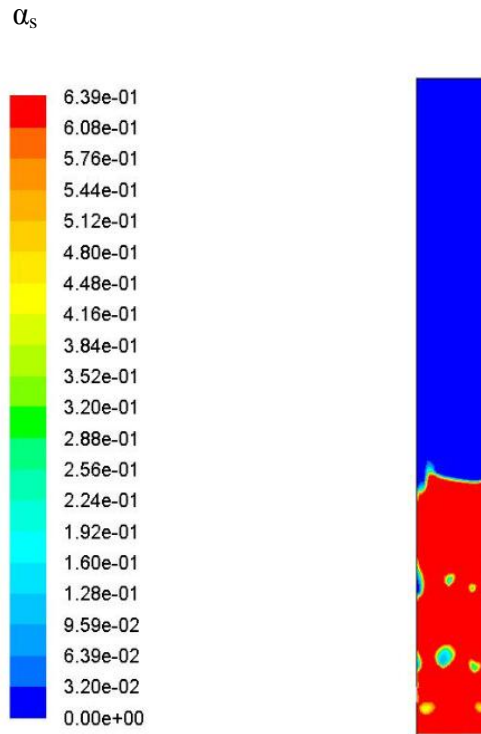


Figura 7.10. Diagrama de fracción volumétrica de sólidos para el caso II ($t=10,25$ s).

La diferencia de velocidad con la que se introducen los gases por la parte inferior respecto al caso anterior es bastante pequeña (de $0,342$ m/s se pasa a $0,3725$ m/s) pero las consecuencias son notables, ya que en el caso II sí que existe burbujeo en todo el volumen al contrario que en el caso I.

Se observa cómo se forman las burbujas en la parte inferior del lecho y van aumentando su tamaño a medida que estas ascienden hasta que colapsan en la superficie superior del lecho. En la figura 7.11 se aprecia el detalle de una burbuja a punto de colapsar.

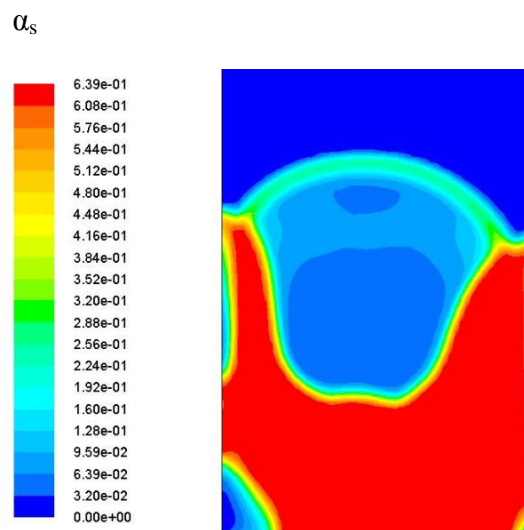


Figura 7.11. Erupción de burbuja en la superficie del lecho instantes antes de colapsar en el caso II ($t=22,25$ s).

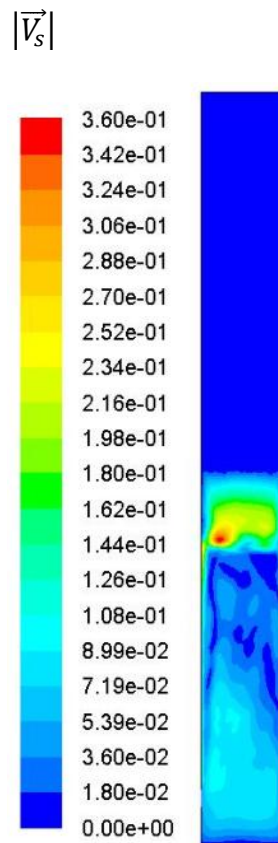


Figura 7.12. Mapa de módulo de velocidad media de los sólidos para el caso II.

La figura 7.12 muestra el mapa de velocidad media de los sólidos donde se observa que la velocidad de las partículas es prácticamente cero en la entrada inferior del lecho donde se encuentra la región de formación de las burbujas, posteriormente aumenta debido a que las partículas son arrastradas por las burbujas incipientes para después estabilizarse hasta la superficie del lecho, donde aumenta mucho debido a que en esta región colapsan las burbujas arrojando las partículas a gran velocidad y provocando importantes fluctuaciones. Posteriormente la velocidad de los sólidos disminuye drásticamente debido a la gravedad. . El descenso que ocurre aproximadamente a 0,5m de altura es debido a que al hacer la media contabilizamos igual las partículas que caen que las que suben, esto hace que la velocidad de partículas media baje al crecer las burbujas.

En los siguientes perfiles de velocidades (figuras 7.13 y 7.14) se observa con más detalle lo explicado en el párrafo anterior. En dichos perfiles se representa la velocidad media de los sólidos y de los gases a diferentes cortes verticales del eje x, que representan la distancia al alimentador lateral.

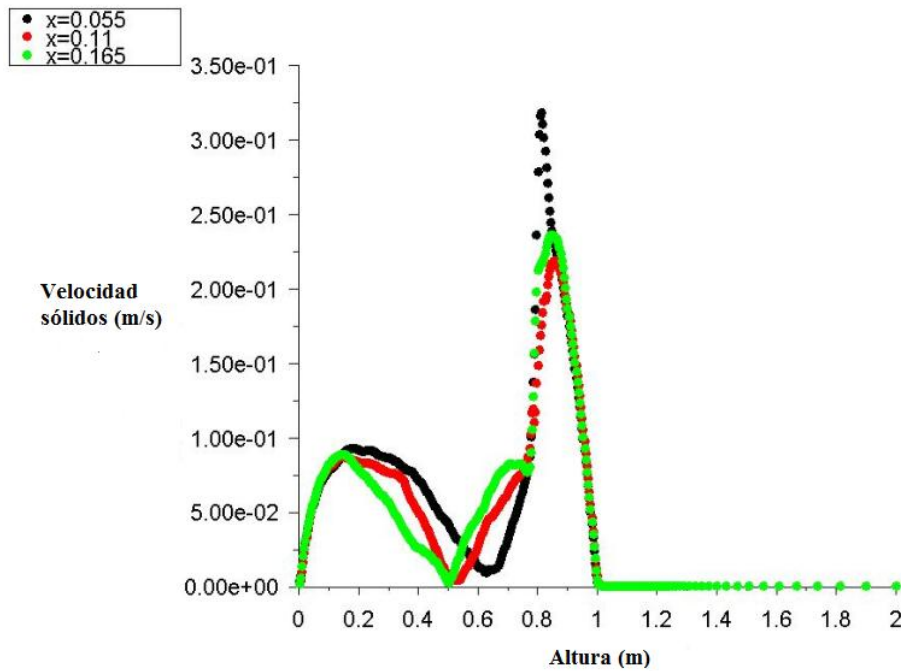


Figura 7.13. Perfil de la velocidad media de los sólidos con respecto a la distancia al distribuidor para diferentes distancias horizontales (x) a la entrada lateral.(caso II)

El pico de velocidad en el perfil de velocidad media para los gases que se da en el corte vertical $x=0,055$, se debe a la aceleración provocada por la erupción de burbujas.

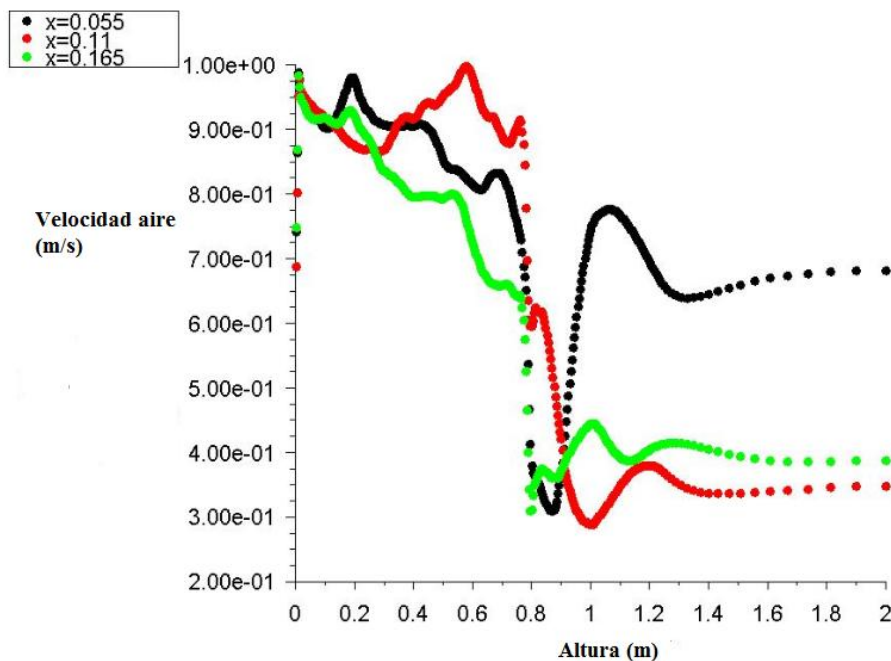


Figura 7.14. Perfil de la velocidad media del gas con respecto a la distancia al distribuidor para diferentes distancias (x) a la entrada lateral (caso II).

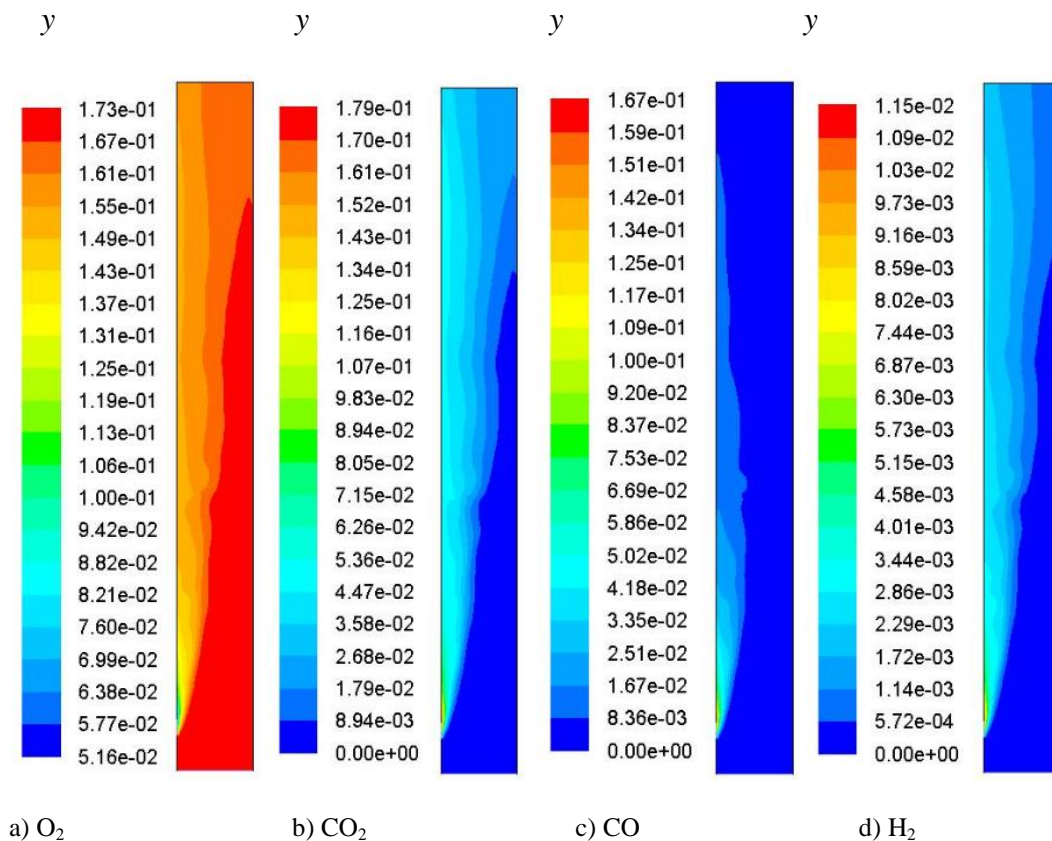
La velocidad de los gases es más alta a la entrada del gasificador y desciende inmediatamente debido al intercambio de cantidad de movimiento con las partículas del lecho. Este descenso es menor para los cortes laterales, ya que las burbujas tienden a

formarse cerca de las paredes en la parte inferior y por lo tanto existe menos rozamiento con las partículas. Sin embargo a medida que se asciende por el lecho aparece un pequeño pico de velocidad en la región central. Esto es debido a que las burbujas migran al centro una vez que se han formado y por lo tanto siendo menor el rozamiento con las partículas en esta región. La aceleración del gas en la región dada por el camino de burbujas representa el conocido efecto de flujo bypass o through-flow (Kunii y Levenspiel, 1991).

Posteriormente se produce un drástico descenso de la velocidad de los gases en la superficie del lecho, ya que son frenados por las partículas que caen por el colapso de las burbujas y también debido a que más arriba sin la presencia de partículas, el gas dispone de toda la sección del lecho para ascender y al repartirse en más área su velocidad baja. En la superficie libre del lecho vuelve a aumentar la velocidad de los gases ya que apenas hay partículas que frenen su avance

7.6.2.2. Concentraciones másicas de cada especie

Para analizar las concentraciones máxicas de cada especie se utilizarán valores estadísticos. En concreto se utilizará la media temporal y la desviación típica de las concentraciones con respecto a la media.



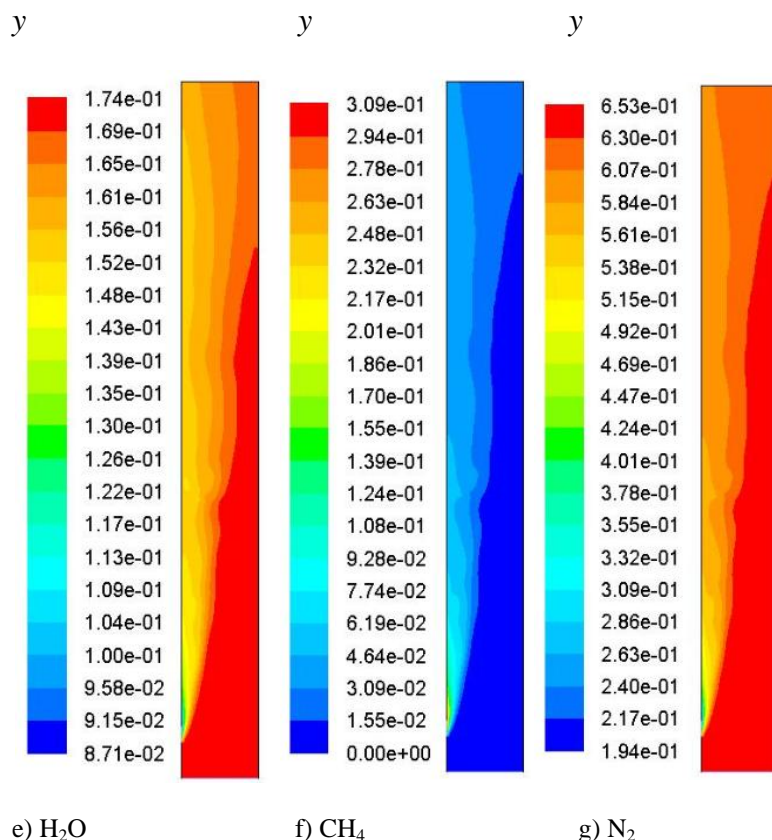


Figura 7.15. Mapa de la media temporal de las concentraciones másicas de las especies gaseosas del gasificador (Caso II).

En los diagramas se observan que la concentración de los gases procedentes de la pirólisis del carbón es superior en la entrada lateral y va disminuyendo a medida que se asciende por el lecho. Aunque no en todos los gases desciende la concentración con la misma intensidad, siendo la disminución de la concentración del monóxido de carbono la que se produce con mayor fuerza debido a la reacción con oxígeno para producir CO₂ y a la reacción de consumo de agua R9.

También se observa que permanece agua y oxígeno a la salida del gasificador lo cual es una señal de que existen reacciones cuyo índice de reacción está siendo bajo. Para conocer que ocurre será necesario analizar los índices de reacción de las diferentes reacciones.

7.6.2.3. Diagramas RMS para las concentraciones molares de los gases

También es interesante conocer si los resultados son estables y no tienen grandes variaciones a temporales. Para ello se utilizara la desviación típica RMS, que es un parámetro estadístico que informa sobre la fluctuación de un valor en un determinado punto. Cuanto mayor sea el RMS en un punto, mayor será su variación con el paso del tiempo.

En los siguientes diagramas se observa los RMS para las concentraciones másicas de las especies gaseosas del lecho.

Se observa que la máxima variación se produce en la entrada lateral para todas las especies, debido por un lado a que la concentración es mayor y por lo tanto las variaciones son de mayor magnitud, y al continuo burbujeo que provoca aumentos de la concentración de los gases con cada burbuja y la consiguiente disminución con el paso de esta. Cerca de la entrada lateral los valores pueden fluctuar más de un 50 % sobre los valores medios que se obtienen allí como se aprecia en la figura 7.16.

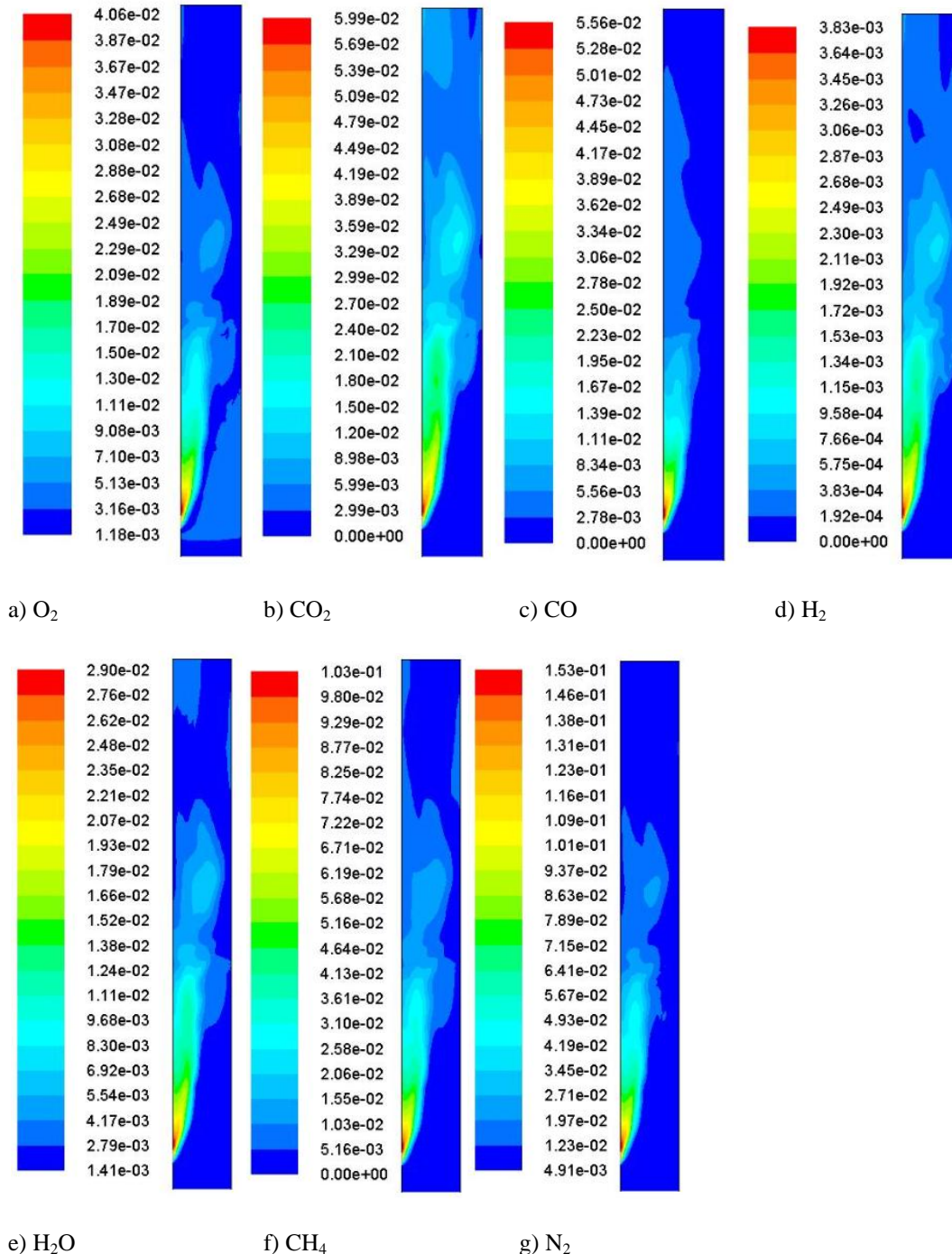


Figura 7.16. RMS de los distintos elementos del lecho

Resulta especialmente interesante la concentración de hidrógeno y de metano debido a que son las especies que serán quemadas en la cámara de combustión para producir

potencia en la turbina de gas. Se van a analizar de manera más exhaustiva los valores viendo como varían en cortes hechos a diferente altura del lecho como se aprecia en la figura 7.17 y 7.18.

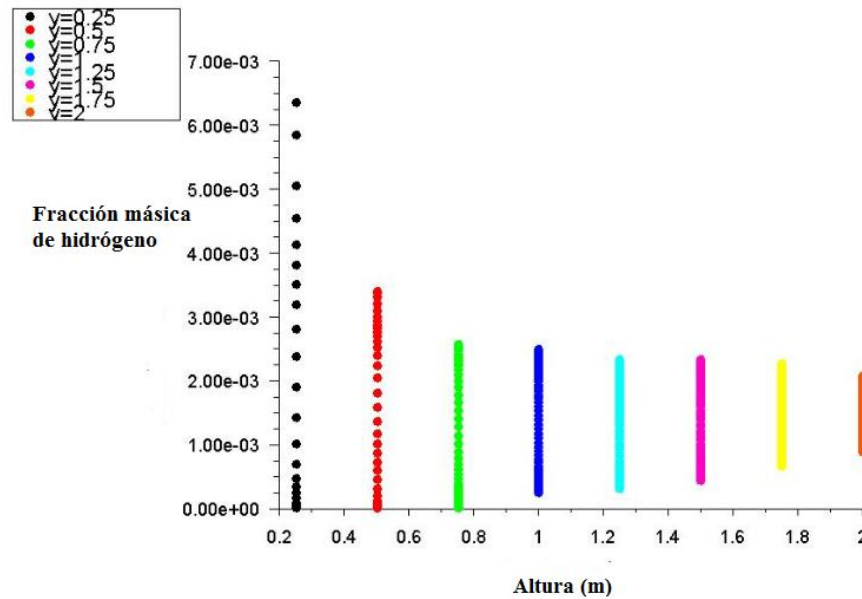


Figura 7.17. Perfil de fracción másica media de hidrógeno a diferentes alturas (Caso II)

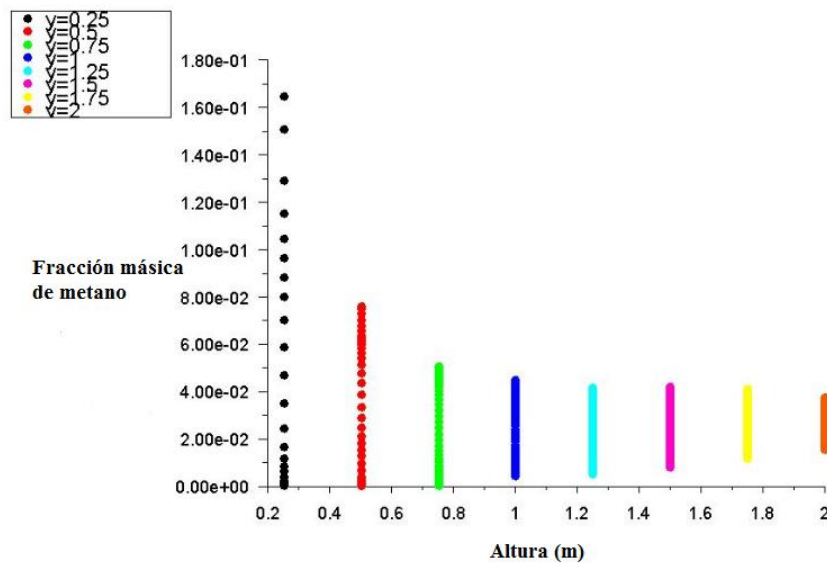


Figura 7.18. Perfil de fracción másica de metano a diferentes alturas (Caso II).

Tanto para el hidrogeno como para el metano, las fracciones másicas tienen valores muy dispersos en la parte inferior del gasificador debido a que hay puntos en la zona cercana a la entrada con valores elevados mientras que en otros puntos la concentración será nula y también porque se difunden por la entrada lateral y se propagan desde allí mediante mezclado turbulento.

A medida que aumenta la altura los valores se van haciendo más homogéneos, disminuyen los valores máximos y aumentan los valores mínimos también debido a que el hidrógeno y el metano se consumen parcialmente. A la salida del lecho (tabla 7.4):

| CASO II | | Fracción másica | |
|-----------|--|-------------------|----------------------|
| Especie | | Mínimo | Máximo |
| Hidrógeno | | $8 \cdot 10^{-4}$ | $2,25 \cdot 10^{-3}$ |
| Metano | | $2 \cdot 10^{-2}$ | $4 \cdot 10^{-2}$ |

Tabla 7.4. Fracción másica a la salida del gasificador de hidrógeno y metano.

Es interesante conocer el RMS de las fracciones másicas de dichas especies de forma que un RMS bajo indican que son valores estables y no fluctúan mucho con el paso del tiempo. Tendríamos las figuras 7.19 y 7.20.

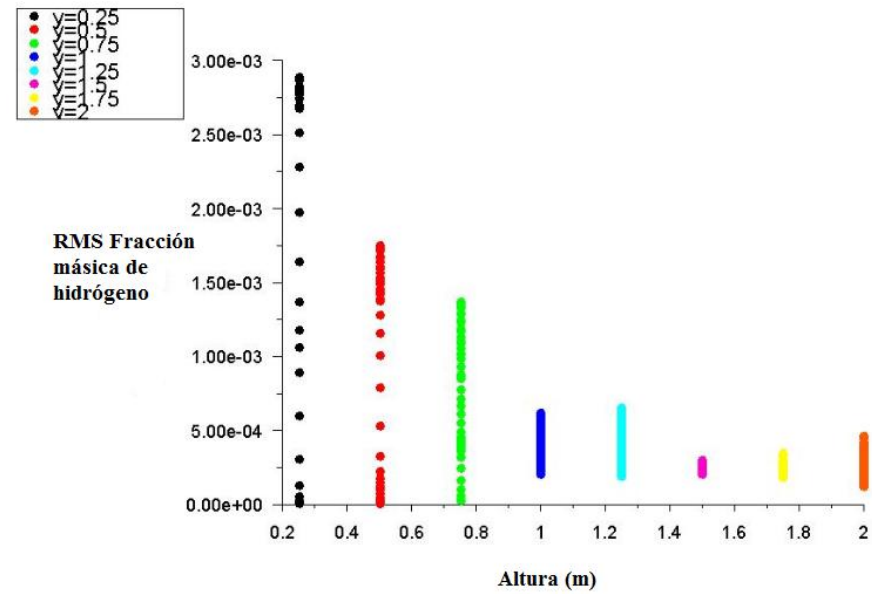


Figura 7.19. RMS Fracción másica de hidrógeno (Caso II).

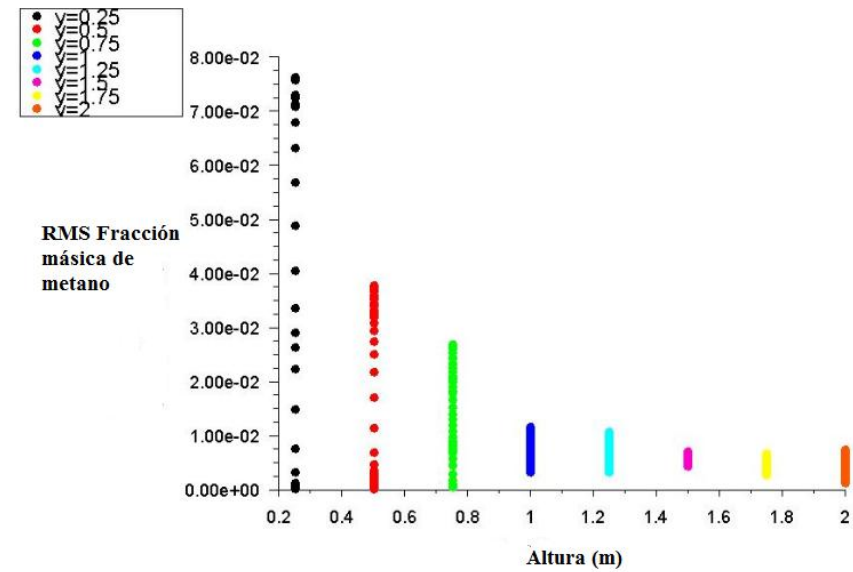


Figura 7.20. RMS Fracción másica de metano para diferentes alturas (Caso II).

El RMS obtenido para ambas especies varía sustancialmente en la parte inferior del lecho y se vuelve más estable en puntos alejados del distribuidor. En la salida tendríamos:

| CASO II | RMS Fracción másica | |
|-----------|---------------------|-------------------|
| Especie | Mínimo | Máximo |
| Hidrógeno | $1 \cdot 10^{-4}$ | $5 \cdot 10^{-4}$ |
| Metano | $1 \cdot 10^{-3}$ | $8 \cdot 10^{-3}$ |

Tabla 7.5. RMS Fracción másica de hidrógeno y metano.

Las variaciones máximas en porcentaje de los valores serían de un 22 % para el hidrógeno y de un 20% para el metano.

7.6.2.4. Comparativa con otros experimentos

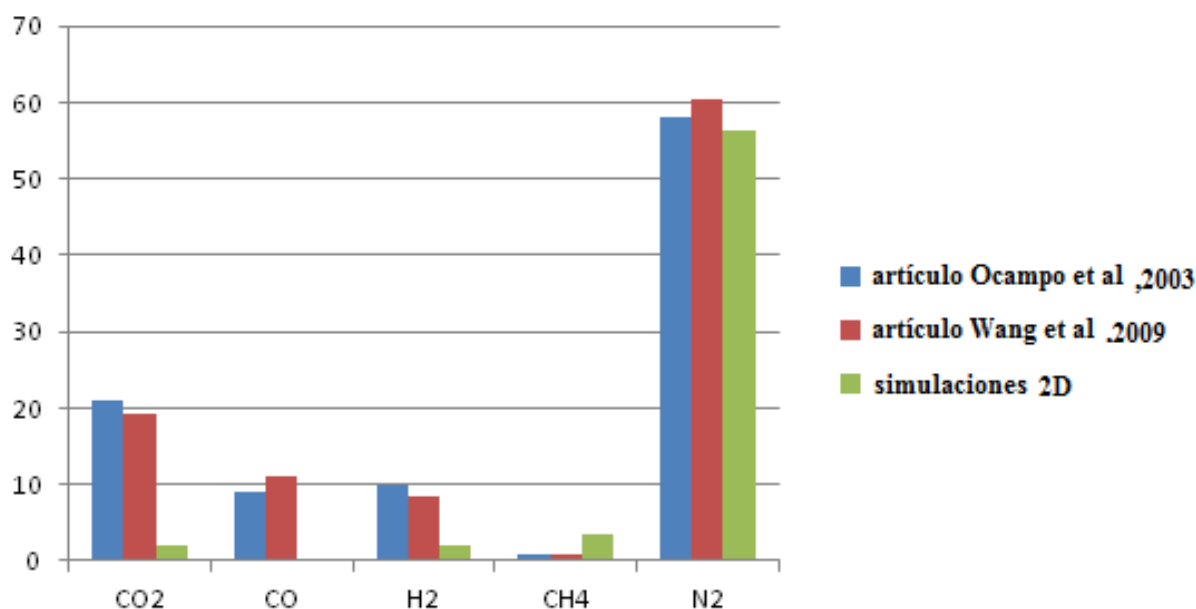


Figura 7.21. Fracción molar a la salida del gasificador (%)

Los datos obtenidos no son coincidentes a los esperados según se observa en la figura 7.21, ya que la formación de CO₂, CO y H₂ son bastante inferiores a los producidos en otros experimentos; sin embargo la fracción molar de CH₄ es ligeramente mayor. Se desconocen las causas de esta discrepancia. Se analizarán los índices de la reacción para saber cuál es la termoquímica del lecho.

7.6.2.5. Índice reacción

El índice de reacción indica la intensidad con la que se producen las reacciones. Según *Ansys Fluent* las unidades son kg·mol/m³s.

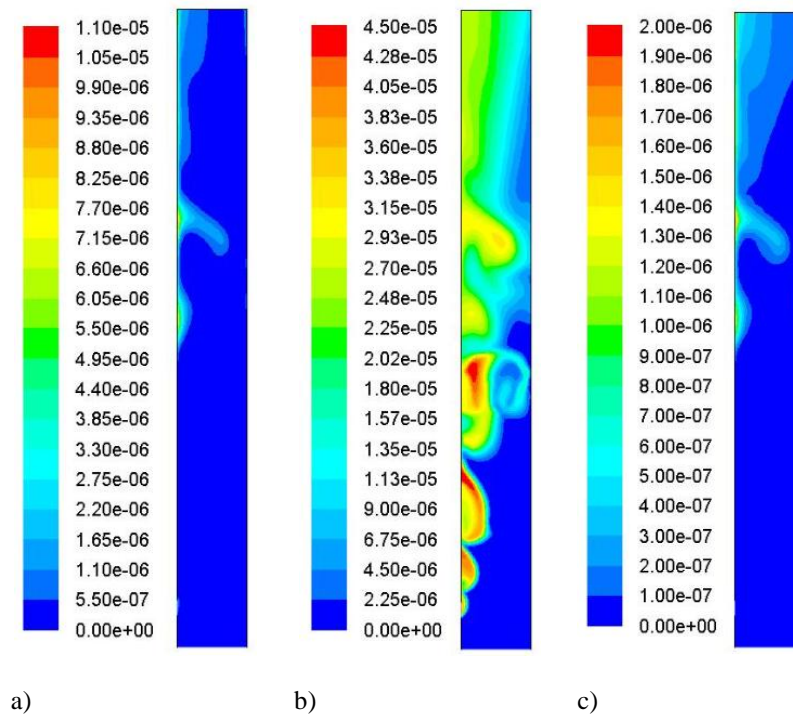
7.6.2.5.1. Homogéneas

Las reacciones homogéneas se producen principalmente en la superficie libre del lecho y en las burbujas como se observa en la figura 7.22.

La reacción que descompone el metano (R8) se realiza principalmente en el tercio superior del lecho, al igual que la reacción (R6). Esto puede ser una razón de porque existe una concentración de metano ligeramente superior a la de otros experimentos y porque la concentración de CO_2 es bastante más baja.

La reacción (R9): $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$ es exotérmica en sentido positivo a baja temperatura, favoreciendo la reacción a bajas temperaturas, por eso en 7.22.d) es más intensa en la parte inferior del lecho. Esto es una razón de la baja concentración de CO a la salida del gasificador.

En general los procedentes de la pirolisis del carbón gases reaccionan dentro de las burbujas ya que la concentración de gases es más alta allí, o en la parte superior del lecho cerca de las paredes ya que las temperaturas son mayores.



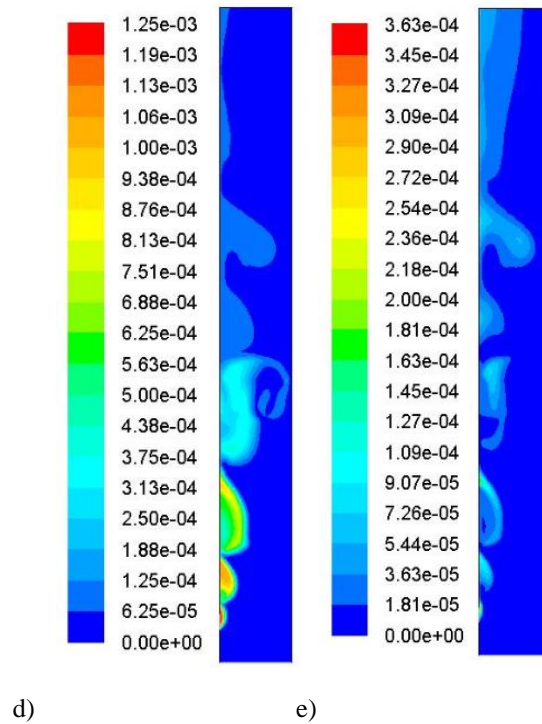


Figura 7.22. Índices de reacciones homogéneas ($t=23,4$ s): a) R6: $\text{CO}+0,5\text{O}_2\rightarrow\text{CO}_2$, b) R7: $\text{H}_2+0,5\text{O}_2\rightarrow\text{H}_2\text{O}$, c) R8: $\text{CH}_4+2\text{O}_2\rightarrow 2\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2$, d) R9: $\text{CO}+\text{H}_2\text{O}\rightarrow\text{H}_2+\text{CO}_2$, e) R9: $\text{H}_2+\text{CO}_2\rightarrow\text{CO}+\text{H}_2\text{O}$

7.6.2.5.2.Heterogéneas

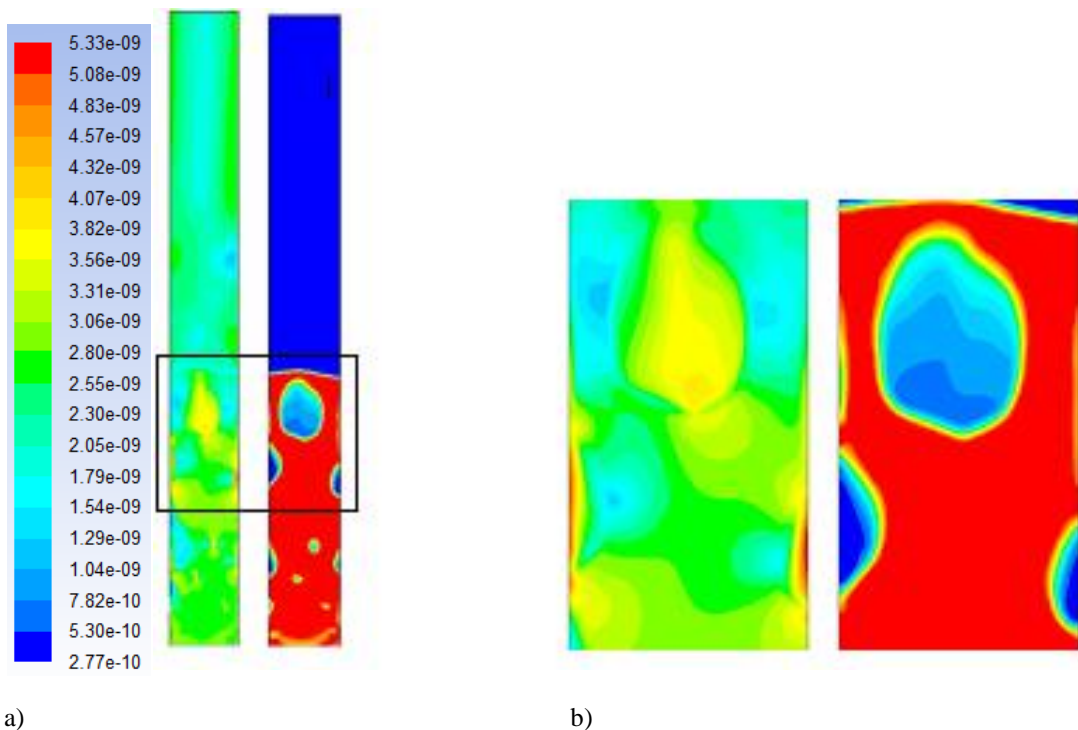


Figura 7.23. a) Distribución del índice de la reacción R3: $\text{C}+0,8\text{O}_2\rightarrow 0,4\text{CO}+0,6\text{CO}_2$, junto a un diagrama de la concentración de partículas. b) Detalle ampliado donde se aprecia la concentración de las reacciones dentro de las burbujas. ($t=23,4$ s).

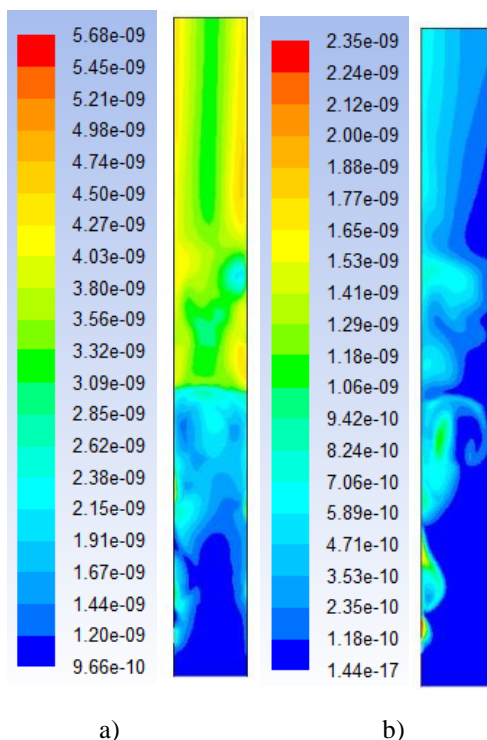


Figura 7.24. Distribución de los índices de reacción ($t=23,4$ s): a) $R4: C + 1,2H_2O \rightarrow 0,8CO + 0,2CO_2 + 1,2H_2$, b) $R5: C + CO_2 \rightarrow 2CO$

Las reacciones heterogéneas muestran un índice de reacción muy inferior al que tenemos en las reacciones homogéneas, esto puede explicar la baja concentración de CO_2 , CO y H_2 ya que son los productos de dichas reacciones.

Las reacciones R3 y R5 se producen en todo el gasificador pero principalmente en las burbujas del lecho debido que es el lugar donde se combina una gran cantidad de carbono junto al oxígeno como se aprecia en la imagen 6.13 b).

La reacción R4 se da principalmente en la superficie libre del lecho donde la concentración de las partículas de carbono es muy escasa, pero sin embargo allí las partículas son muy reactivas debido a la mayor superficie de contacto con los gases, a las mayores temperaturas que se alcanzan en esta región del lecho, especialmente cerca de las paredes y a que la concentración de agua sigue siendo importante.

7.6.2.6. Distribución temperaturas

Las reacciones homogéneas, que se concentran en la superficie superior del lecho tienen un índice de reacción superior a las heterogéneas que se dan principalmente en el lecho y en las burbujas. Esto explica las mayores temperaturas en la parte superior del gasificador como se aprecia en la figura 7.25.

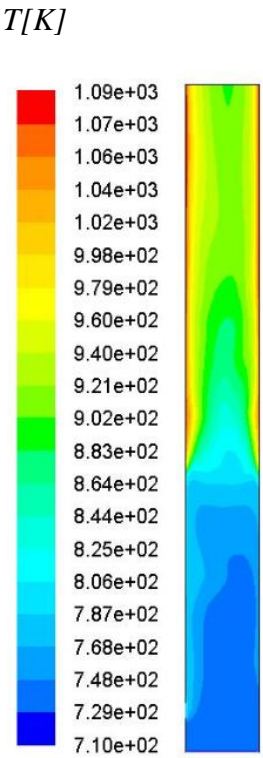


Figura 7.25. Mapa de temperaturas (caso II).

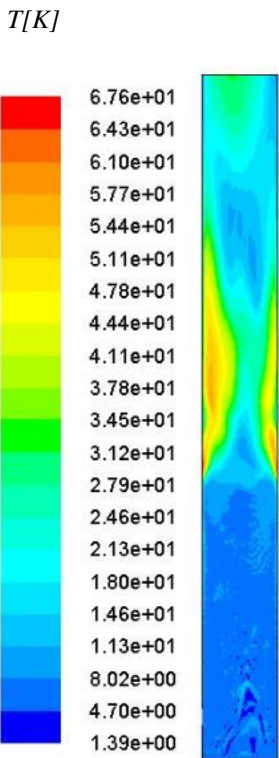


Figura 7.26. Mapa RMS temperaturas (caso II).

Las mayores fluctuaciones de temperatura se producen a una altura de entre 1 y 1,5m y en la zona cercana a las paredes, debido a que en esta región existe bastante agitación

por la coalescencia y el colapso de las burbujas y las reacciones homogéneas se encuentran más activas.

Los valores más importantes a la salida del gasificador se encuentran en la tabla 7.6. Estos valores se han calculado gracias a que los datos de las diferentes variables se han almacenado mediante la opción “*Surface monitors*” que posé *Ansys Fluent* y se ha calculado la media posteriormente mediante *Excel*.

| Fracción másica | Valores medios | Desviación típica |
|---|-------------------|----------------------|
| O ₂ | 0,1613 | $2,25 \cdot 10^{-3}$ |
| CO ₂ | 0,033 | $5 \cdot 10^{-3}$ |
| H ₂ | 0,00155 | $2,5 \cdot 10^{-4}$ |
| H ₂ O | 0,1615 | $2,5 \cdot 10^{-3}$ |
| CH ₄ | 0,0256 | $3 \cdot 10^{-3}$ |
| N ₂ | 0,615 | $7 \cdot 10^{-3}$ |
| CO | $2 \cdot 10^{-3}$ | $1 \cdot 10^{-3}$ |
| Temperatura(k) | 968 | 18 |
| Caudal másico a la salida del gasificador (kg/s) | 0,04 | 0,004 |

Tabla 7.6. Valores más importantes a la salida del gasificador (valores medios)

7.6.3. Caso III

Las condiciones para el caso III eran una vez hecho el ajuste a 2 dimensiones:

| Condiciones operación | Caso III |
|---|-------------------|
| <i>Temperatura de aire y de vapor a la entrada(K)</i> | 641 |
| <i>Temperatura entrada lateral (K)</i> | 800 |
| <i>Temperatura del reactor (K)</i> | 1099 |
| Entrada inferior | |
| <i>Velocidad entrada (m/s)</i> | 0,421 |
| <i>Fracción molar O₂</i> | 0,15 |
| <i>Fracción molar H₂O</i> | 0,20556 |
| <i>Fracción molar N₂</i> | 0,6445 |
| Entrada lateral | |
| <i>Velocidad entrada gases (m/s)</i> | 0,318 |
| <i>Velocidad entrada char (m/s)</i> | $6 \cdot 10^{-5}$ |
| <i>Fracción molar CO₂</i> | 0,109 |
| <i>Fracción molar H₂O</i> | 0,054 |
| <i>Fracción molar CH₄</i> | 0,522 |
| <i>Fracción molar CO</i> | 0,162 |
| <i>Fracción molar H₂</i> | 0,153 |

Tabla 7.7. Datos utilizados en el caso III

7.6.3.1. Patrón de flujo

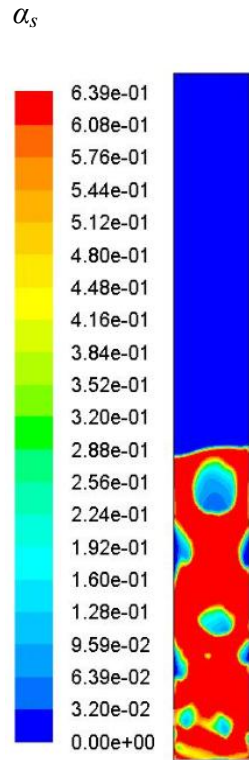


Figura 7.27. Mapa instantáneo de la fracción volumétrica de sólidos (t=18 s).

En la figura 7.27 se observa un burbujeo mucho más intenso que el que se daba en los casos anteriores debido a que la velocidad de entrada de los gases por la parte inferior del gasificador es mayor.

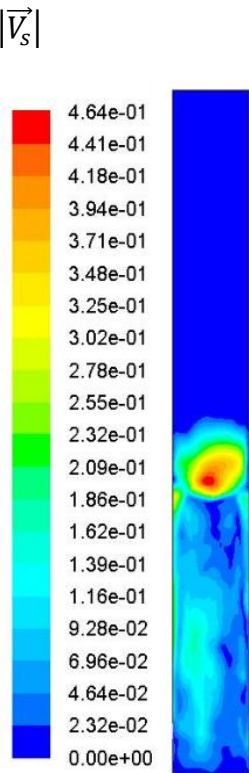


Figura 7.28. Mapa de módulo de velocidad de la velocidad media de los sólidos para el caso III.

La velocidad que alcanzan los sólidos en la superficie libre es bastante mayor que en el caso II debido que al introducirse los gases a mayor velocidad, estos imprimen más cantidad de movimiento a las partículas, siendo el pico de velocidad en la zona central alrededor de un 100% mayor que el que existía en el caso II como se aprecia en la figura 7.29.

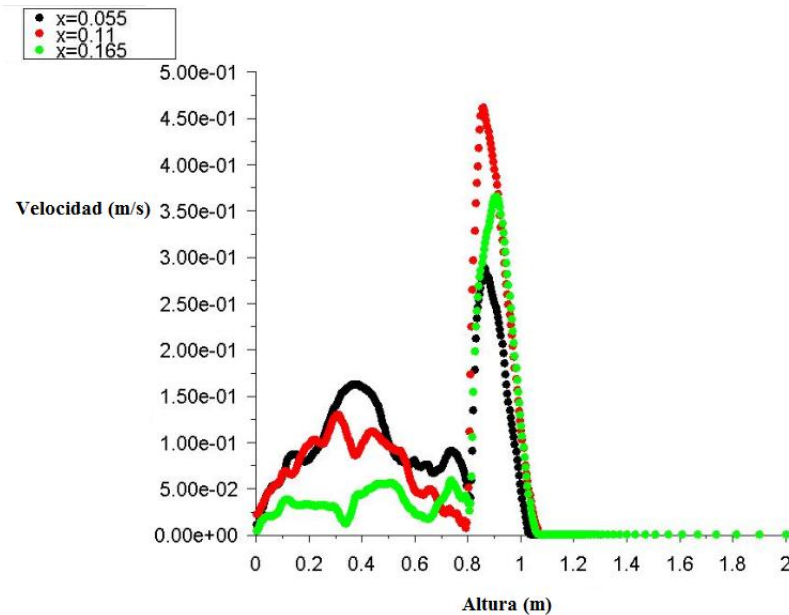


Figura 7.29. Perfil del módulo de velocidad media de sólidos con respecto a la distancia al distribuidor para diferentes distancias horizontales (x) a la entrada lateral..

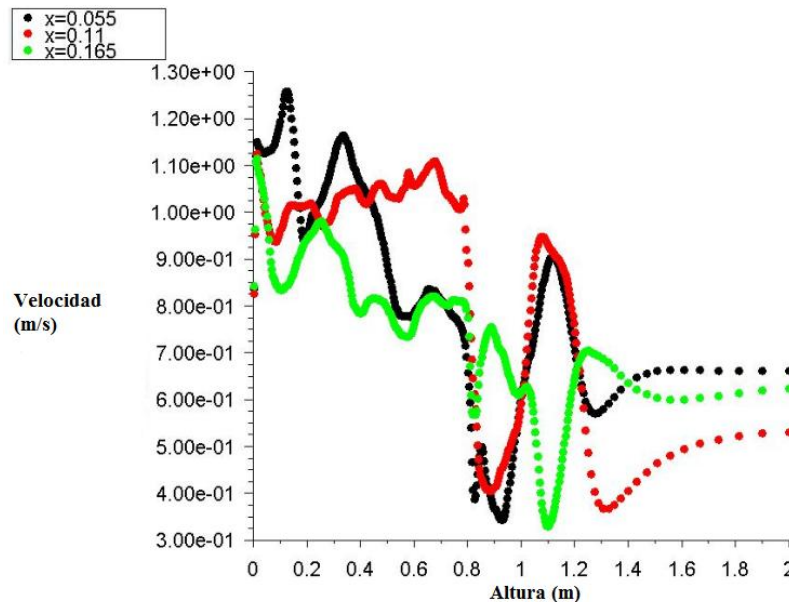


Figura 7.30. Perfil del módulo de la velocidad media de los gases con respecto a la distancia al distribuidor para diferentes distancias horizontales (x) a la entrada lateral.

La velocidad de los gases cae con fuerza en la región central y se observa al igual que en el caso anterior el pico de velocidad que alcanzan los gases para el corte a $x=0.055$

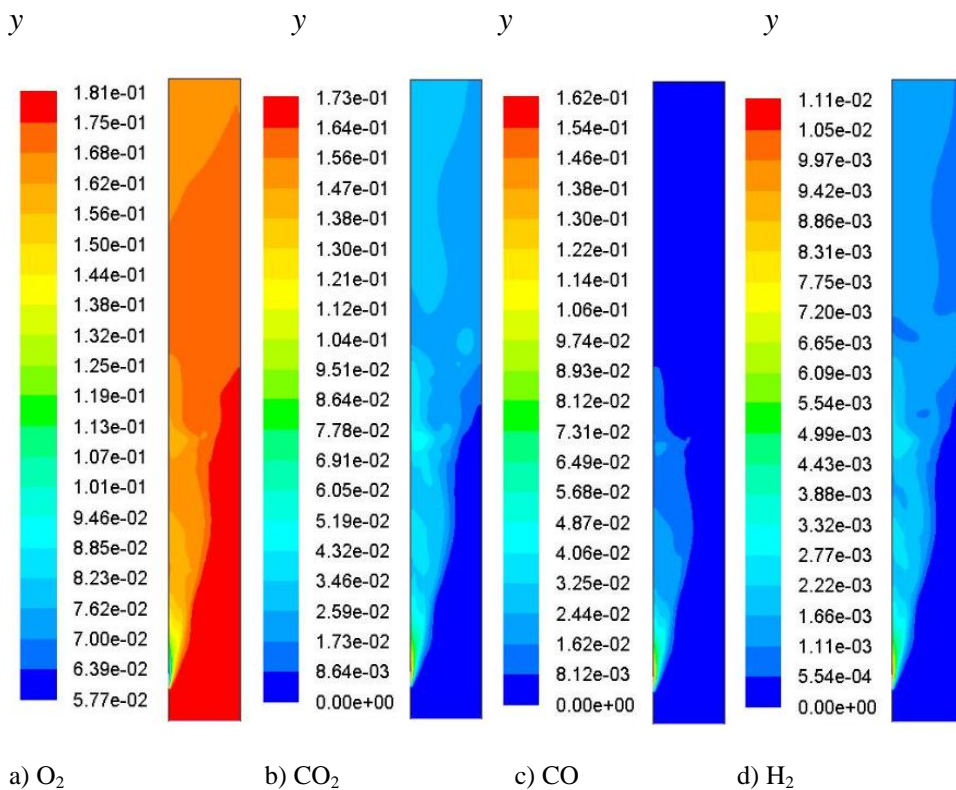
justo después de 0,1 m de altura que es donde se encuentra la entrada y por lo tanto hay un aumento de los gases en ese lugar.

Se aprecia otro pico de velocidad en los cortes más extremos entre 0,3 m y 0,4 m debido a que las primeras burbujas se forman en mayor grado cerca de las paredes y por lo tanto es menor la concentración de partículas que puedan frenar por rozamiento a los gases. También se aprecia otro pico de velocidad pero esta vez en la región central entre 0,7 m y 0,8 m debido a que las burbujas cuando alcanzan cierto tamaño tienden a migrar a la región central del lecho.

Posteriormente existe una caída brusca de la velocidad al llegar a la superficie porque los gases son frenados por las partículas que caen después de colapsar las burbujas, y su posterior recuperación al disminuir la concentración de partículas que puedan frenarlos a partir de esa altura. El hecho de que la concentración de partículas sea casi nula por encima de la superficie libre del lecho proporciona más sección de paso para el gas, lo cual hace que la velocidad del gas baje. Otros efectos como el consumo de especies y la dilatación térmica del gas influyen también en la velocidad.

Este proceso aparece con una intensidad menor y a una altura algo mayor para el corte más lejano a la entrada lateral, debido a que el caudal de gases en esa región es algo menor.

7.6.3.2. Concentraciones máxicas de cada especie.



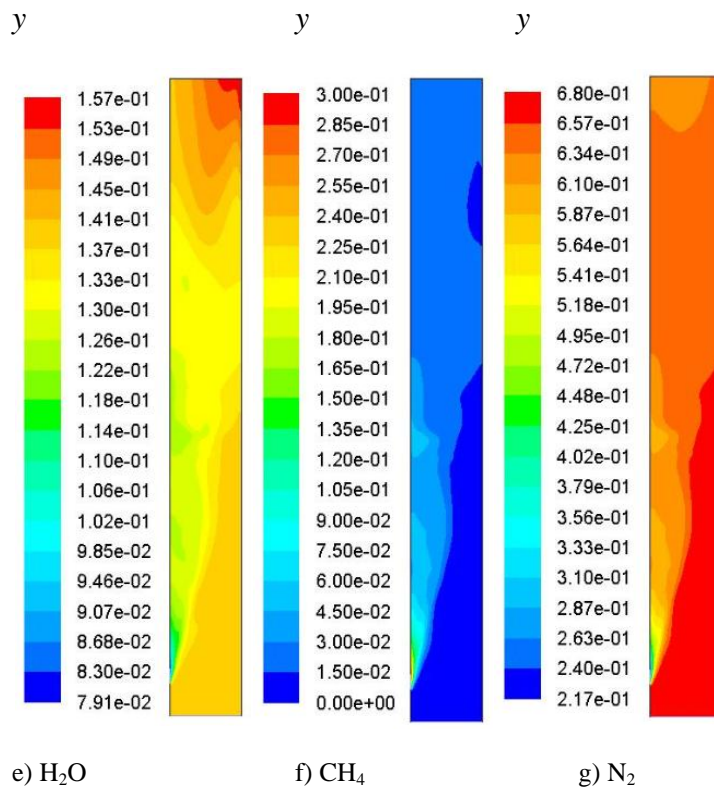


Figura 7.31. Concentraciones másicas para cada una de las especies en valores estadísticos.

La concentración de los gases formados por la pirolisis del carbón tienen su concentración más alta en la entrada lateral y esta disminuye a medida que se asciende.

Al igual que en el caso anterior la concentración de CO disminuye más que en el resto de especies debido a la reacción (R6) y sobre todo a (R9). También permanece agua y oxígeno a la salida del gasificador, por lo que posiblemente algunas reacciones como R3, R4 y R5 no sean muy activas.

7.6.3.3. Diagramas RMS para las concentraciones másicas de los gases

En los diagramas RMS que se aprecian en la figura 7.32 informan de la desviación típica sobre la media de las concentraciones másicas de los gases.

Se observa una mayor variación en la entrada lateral porque la concentración es mayor y por el continuo burbujeo que provoca aumentos de la concentración de los gases con cada burbuja y la consiguiente disminución con el paso de esta.

Las desviaciones típicas que se aprecian en el caso III son menores que las que se daban en el caso II, por lo que los resultados son más estacionarios en el tiempo.

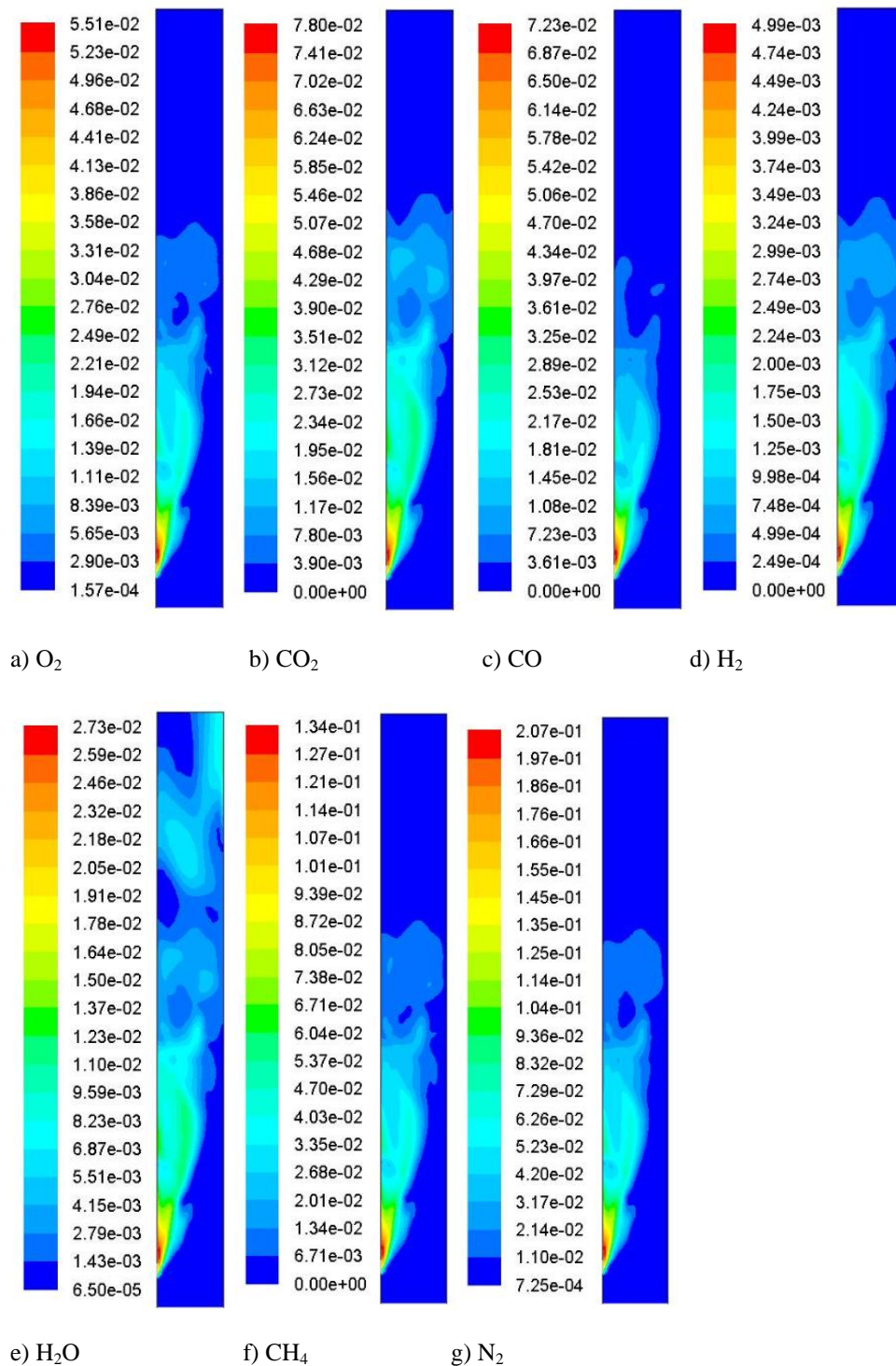


Figura 7.32. Diagramas RMS para las concentraciones másicas de los gases.

Resulta especialmente interesante la concentración de hidrógeno y metano a la salida ya que son los gases que van a ser quemados en la caldera para producir potencia en el ciclo.

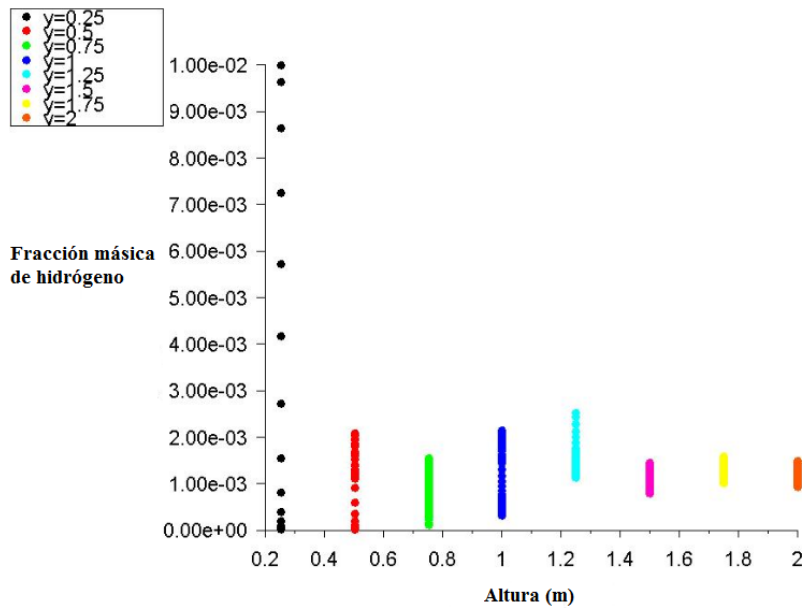


Figura 7.33. Perfil de la fracción másica de hidrógeno en cortes realizados en el gasificador a diferentes alturas. Valores de media temporal (caso III).

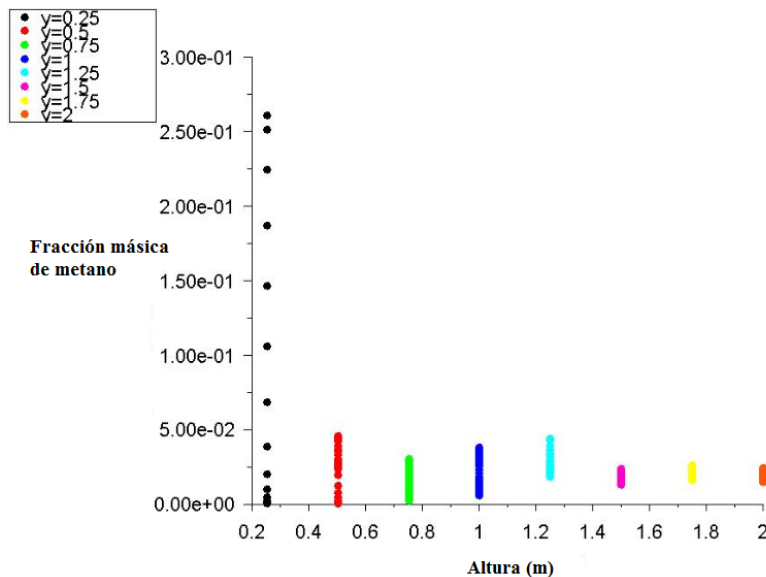


Figura 7.34. Perfil de la fracción másica de metano en cortes realizados en el gasificador a diferentes alturas. Valores de media temporal (caso III).

Al igual que en el caso anterior se observa una mayor dispersión de los valores de la concentración másica en la parte inferior del lecho y esta va disminuyendo con la altura.

En comparación con el caso anterior se ve que en el caso III la dispersión de los valores obtenidos a cada altura es inferior a los obtenidos en el caso anterior. La dispersión se crea en función de lo cerca que este cada punto a la entrada lateral ya que la concentración de los gases será mayor en ese lugar.

Al aumentar la velocidad de los gases que se introducen por la entrada inferior, aumenta el burbujeo y por lo tanto el mezclado de los gases y sólidos en el lecho. De ahí que los valores de concentración estudiados sean más homogéneos.

| CASO III | Fracción másica | |
|-----------|-------------------|---------------------|
| Especie | Mínimo | Máximo |
| Hidrógeno | $1 \cdot 10^{-3}$ | $1,5 \cdot 10^{-3}$ |
| Metano | $2 \cdot 10^{-2}$ | $3 \cdot 10^{-2}$ |

Tabla 7.8. Fracción másica del hidrógeno y del metano a la salida del gasificador.

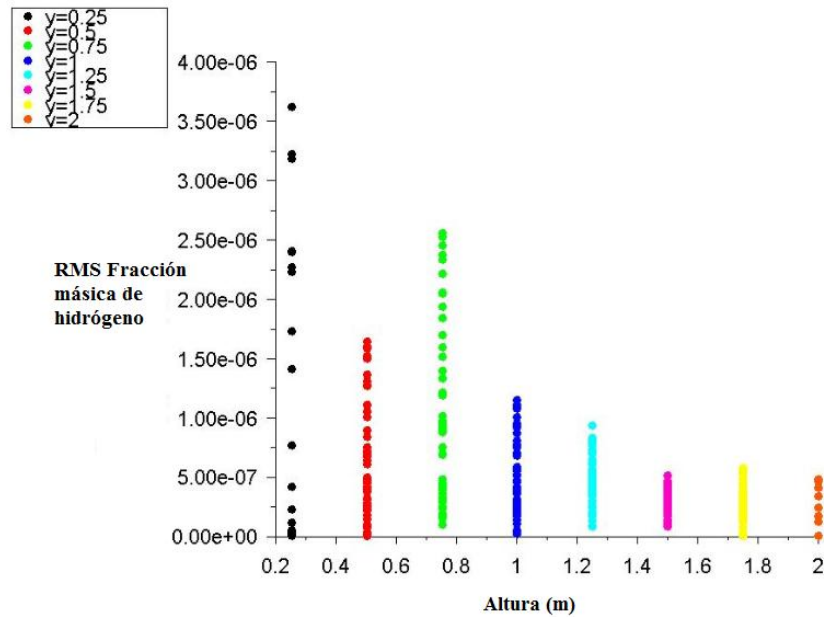


Figura 7.35. RMS Fracción másica de hidrógeno

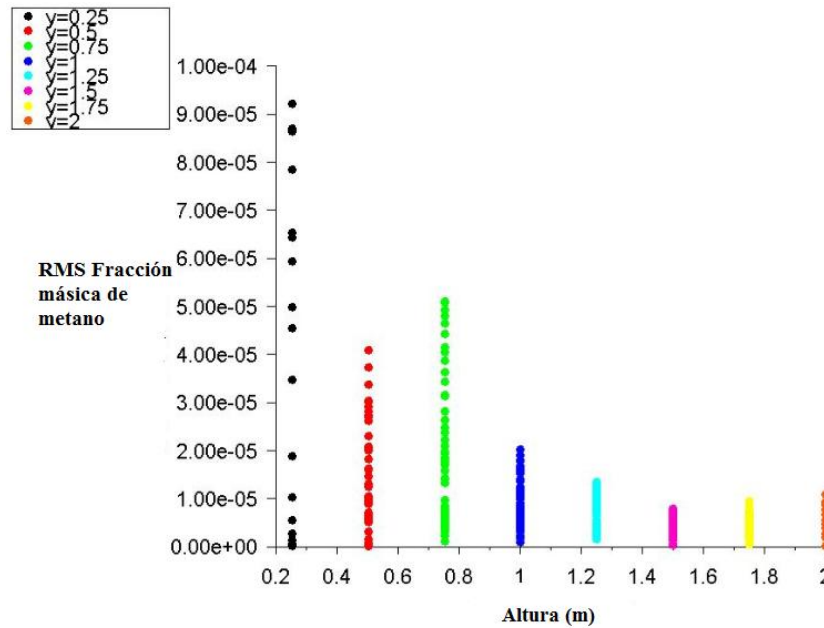


Figura 7.36. RMS fracción másica de metano

En los diagramas RMS a diferencia de los diagramas de la concentración másica en lugar de disminuir la dispersión entre los valores con la altura, aumentan entre 0,4 m y 0,7 m como se aprecia en las figuras 7.35 y 7.36. Esto se debe a que se produce un tiempo de retardo en las reacciones dentro de la burbuja que generan RMS altos por encima del alimentador.

Al aumentar el burbujeo aumenta la fluctuación de los valores de la concentración de las especies en cada punto con independencia de lo cerca o lejos que se encuentren de la entrada lateral. Sin embargo los valores en términos absolutos son mucho menores que en el caso anterior, por lo que se pueden considerar más robustos los resultados obtenidos.

| CASO III | RMS Fracción másica | |
|-----------------|----------------------------|-------------------|
| Especie | Mínimo | Máximo |
| Hidrógeno | $1 \cdot 10^{-7}$ | $5 \cdot 10^{-7}$ |
| Metano | $1 \cdot 10^{-5}$ | $1 \cdot 10^{-5}$ |

Tabla 7.9. RMS Fracción másica de hidrógeno y metano a la salida.

Las variaciones a la salida en porcentaje serían de un 0,033% para el hidrógeno y el metano, por lo que los resultados son mucho más estables con el paso del tiempo.

7.6.3.4. Comparativa con otros experimentos

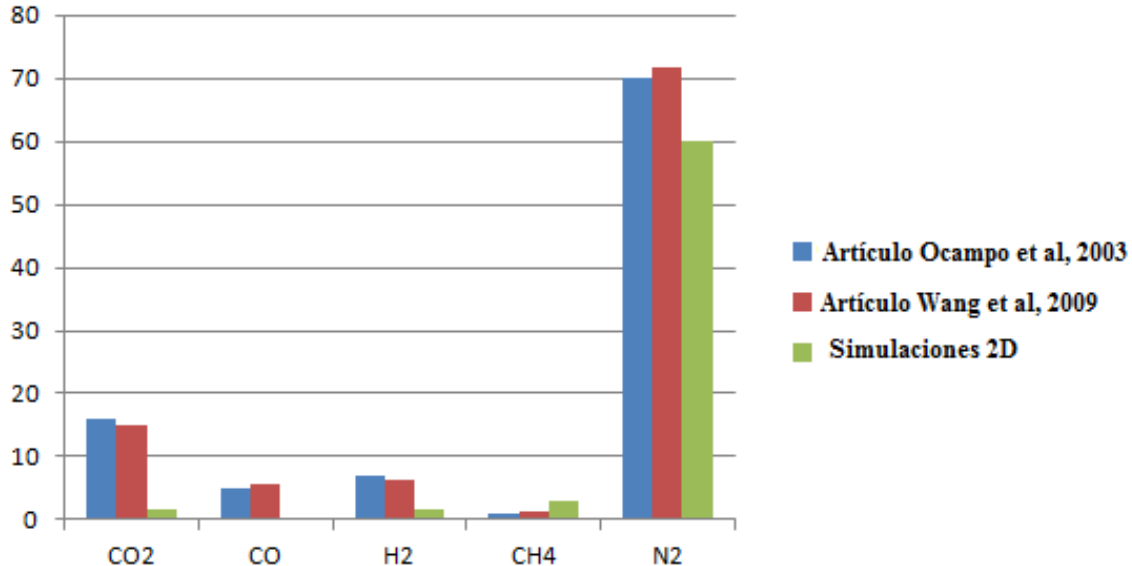


Figura 7.37. Comparativa con los datos obtenidos en otros artículos.

Al comparar nuestros resultados con los obtenidos en otros artículos (Ocampo et al, 2003)y (Wang et al, 2009) se observa que los valores de CO₂, CO e hidrógeno son bastante inferiores y existe un ligero aumento de la concentración de metano. Se desconocen las causas de esta discrepancia pero es posible que las reacciones heterogéneas estén siendo poco eficientes ya que los productos de dichas reacciones son precisamente CO₂, CO e hidrógeno.

7.6.3.5. Índice reacción

En este apartado se analizarán las diferentes índices de reacción para las reacciones homogéneas (figura 7.38) y heterogéneas (figura 7.39).

7.6.3.5.1. Homogéneas

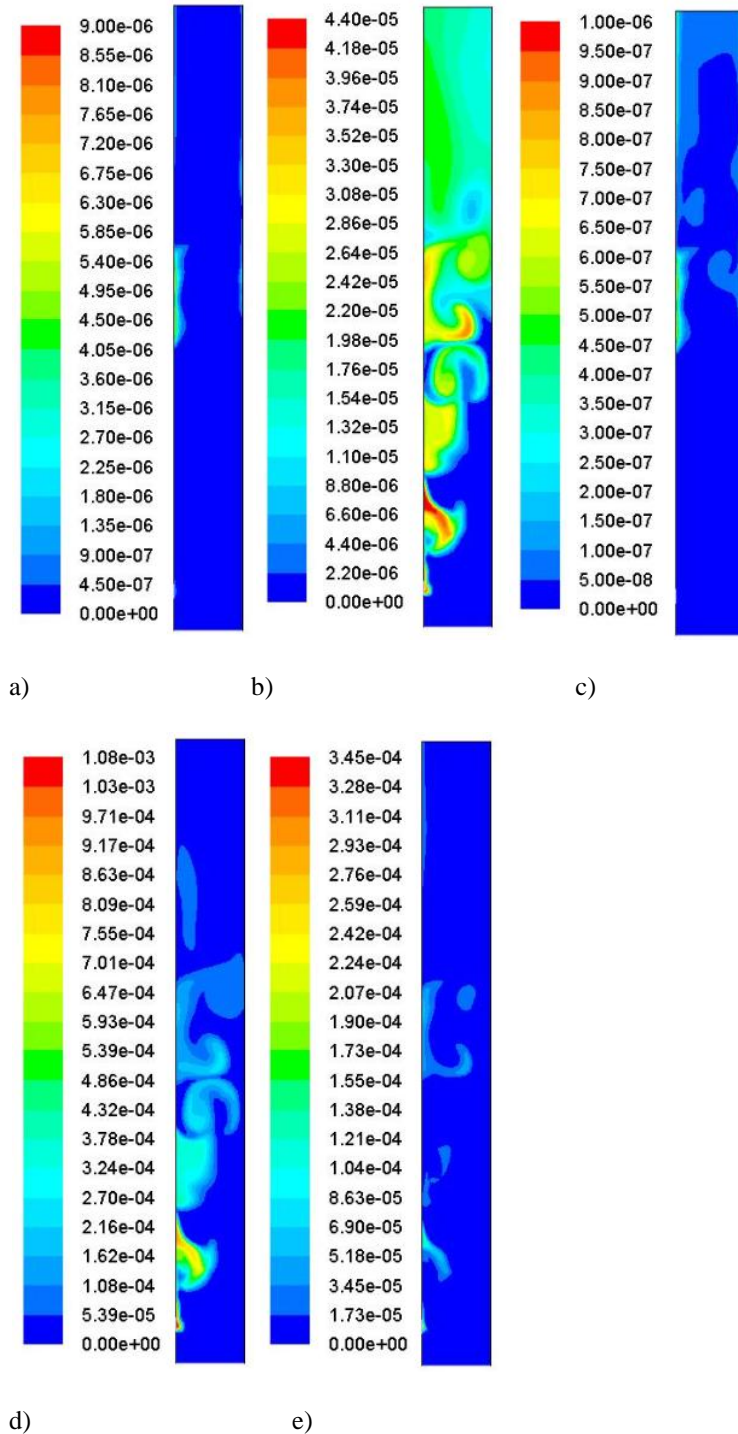
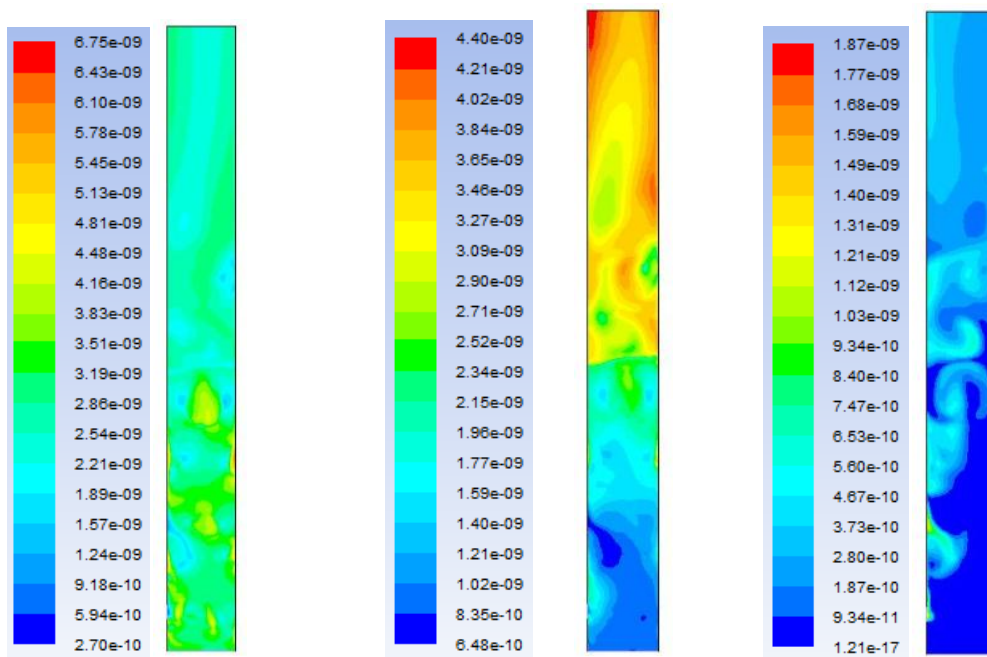


Figura 7.38. Índices de reacciones homogéneas (caso III) ($t=23,4$ s): a) R6: $\text{CO} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$, b) R7: $\text{H}_2 + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$, c) R8: $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$, d) R9: $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$, e) R9: $\text{H}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$

Al observar las reacciones homogéneas se aprecia que la reacción (R6) es poco activa, debido a que el monóxido de carbono se consume principalmente por el equilibrio R9: $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$, que se desplaza hacia la derecha al ser exotérmica a bajas temperaturas, que son las que hay en la parte inferior del lecho.

El hidrógeno se consume principalmente con la reacción (R7). El resto de reacciones son menos reactivas que en el caso anterior ya que la temperatura de entrada de los gases por la parte inferior y la temperatura del reactor son inferiores a las del caso II

7.6.3.5.2. Heterogéneas



a) R3: $\text{C} + 0.8\text{O}_2 \rightarrow 0.4\text{CO} + 0.6\text{CO}_2$ b) R4: $\text{C} + 1.2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 0.8\text{CO} + 0.2\text{CO}_2$ c) R5: $\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO}$

Figura 7.39. Reacciones heterogéneas ($t=23,4$ s)

Las reacciones heterogéneas tienen unos índices de reacción en general más bajos que las reacciones homogéneas aunque están más distribuidas por el lecho.

La reacción R3 se produce en todo el gasificador pero principalmente en las burbujas del lecho debido que es el lugar donde se combina una gran cantidad de carbono junto a una gran concentración de oxígeno.

La reacción R4 se da principalmente en la superficie libre del lecho donde la concentración de las partículas de carbono es muy escasa, pero sin embargo muy reactivas debido a la mayor superficie de contacto con los gases. La reacción es especialmente activa a la salida del gasificador cerca de las paredes ya que las mayores temperaturas se dan en este lugar como se aprecia en la figura 7.40 y a que la concentración de agua sigue siendo importante.

La reacción R5 está más influida por la concentración de CO_2 , ya que es más activa en las burbujas del lecho, que por las altas temperaturas que se dan en la parte alta del lecho.

7.6.3.6. Distribución temperaturas

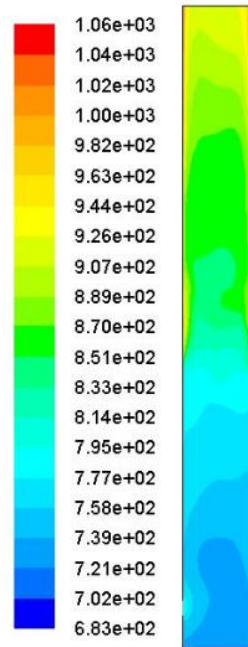


Figura 7.40. Distribución de temperaturas. Datos estadísticos.

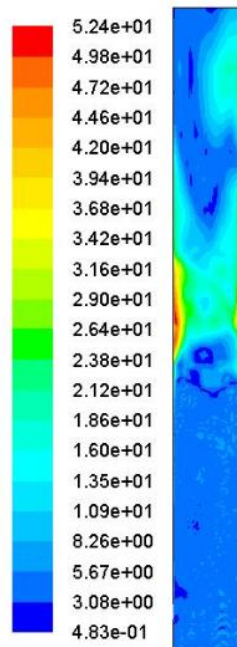


Figura 7.41. RMS distribución de temperaturas. Datos estadísticos.

Las temperaturas son mayores en la parte superior del lecho debido a que las reacciones homogéneas son más activas provocando este aumento de la temperatura.

Las mayores fluctuaciones de temperatura se producen a una altura de entre 1 y 1,5m y en la zona cercana a las paredes, debido a que en esta región existe bastante turbulencia por el colapso de las burbujas y las reacciones homogéneas se encuentran más activas.

Los valores más importantes a la salida del gasificador se encuentran en la tabla 7.10.

| Fracción másica | Valor medio | Desviación típica |
|--|-------------|---------------------|
| O ₂ | 0.169 | $5 \cdot 10^{-5}$ |
| CO ₂ | 0.026 | $6 \cdot 10^{-6}$ |
| H ₂ | 0.0012 | $3 \cdot 10^{-7}$ |
| H ₂ O | 0.144 | $3 \cdot 10^{-5}$ |
| CH ₄ | 0.019 | $4 \cdot 10^{-6}$ |
| N ₂ | 0.64 | $1,5 \cdot 10^{-4}$ |
| CO | 0.001 | $2 \cdot 10^{-7}$ |
| Temperatura(k) | 915 | 0,3 |
| Caudal másico a la salida del gasificador (kg/s) | 0.048 | 0,002 |

Tabla 7.10. Valores más importantes a la salida del gasificador para el caso III (valores medios)

7.7. Integración con un ciclo de potencia

7.7.1. Rendimiento del gasificador

Los gases producidos en el gasificador se introducen en la cámara de combustión para quemarlos y así hacer funcionar el ciclo de potencia.

La energía producida al quemar los gases vendrá dada por la siguiente ecuación:

$$\dot{Q}_{gas} = (\dot{m}_H \cdot PCI_H + \dot{m}_{CH_4} \cdot PCI_{CH_4}) \cdot \eta_{comb} \quad (7.1)$$

| Especie | PCI |
|-----------|---------------|
| Hidrógeno | 120.011 kJ/kg |
| Metano | 50.010 kJ/kg |

Tabla 7.11. Poderes caloríficos del hidrógeno y del metano en kJ/kg.

El caudal másico de cada elemento vendrá dado por la multiplicación del caudal de gases a la salida del gasificador y la fracción másica.

| Caso | \dot{m}_H (kg/s) | \dot{m}_{CH_4} (kg/s) | \dot{Q}_{gas} (kW) |
|------|----------------------|-------------------------|----------------------|
| II | $6,2 \cdot 10^{-5}$ | $1,024 \cdot 10^{-3}$ | 58,65 |
| III | $5,76 \cdot 10^{-5}$ | $9,12 \cdot 10^{-4}$ | 52,52 |

Tabla 7.12. Caudales másicos de hidrógeno y metano para el caso II y caso III. También se proporciona la energía producida al quemarlos en la caldera (kW).

Conociendo la potencia producida por los gases procedentes del gasificador, se puede hallar el rendimiento del gasificador que vendrá dado por la siguiente fórmula:

$$\eta_{\text{gasificador}} = \frac{\dot{Q}_{\text{gas}}}{\dot{Q}_{\text{carbón}}} \quad (7.2)$$

Siendo $\dot{Q}_{\text{carbón}}$ la potencia calorífica que tiene el carbón que es introducido en el gasificador y viene dado por la siguiente fórmula:

$$\dot{Q}_{\text{carbón}} = \dot{m}_c \cdot PCI_c \quad (7.3)$$

Donde:

- \dot{m}_c , es el caudal másico de carbón que introducimos y era de 23,16 kg/h.
- PCI_c , es el poder calorífico inferior del carbón en kJ/kg. En este caso será de 28.400 kJ/kg.

$$\dot{Q}_{\text{carbón}} = \dot{m}_c \cdot PCI_c = \frac{23,16 \text{ kg}}{h} \cdot \frac{h}{3600s} \cdot 28.400 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} = 182,7 \text{ kW}$$

El rendimiento del gasificador para cada uno de los casos será:

| Caso | $\eta_{\text{gasificador}}$ |
|------|-----------------------------|
| II | 0,32 |
| III | 0,287 |

Tabla 7.13. Rendimiento del gasificador para el caso II y el caso III.

7.7.2. Rendimiento termodinámico del ciclo

El rendimiento del ciclo vendrá dado por la siguiente ecuación: $\eta_{\text{ciclo}} = \frac{\dot{W}_n}{\dot{Q}_{\text{gas}}} \quad (7.4)$

Donde \dot{W}_n es el trabajo neto producido en el ciclo. Se obtiene mediante *Cyclepad*.

Caso II

```

Modeled as: not HEAT-PUMP
Modeled as: not REFRIGERATOR
Modeled as: HEAT-ENGINE
eta-Carnot = 80.79%
eta-thermal = 41.68%
  Tmax = 1,500 K
  Tmin = 288.1 K
  Pmax = 1,800 kPa
  Pmin = 100.0 kPa
max-m-dot = UNKNOWN kg/s
Power in = -32.86 kW
Power out = 57.31 kW
net-power = 24.44 kW
back-work-ratio = 57.35%
work-ratio = 42.65%
Q-dot in = 58.65 kW
Q-dot out = -34.21 kW
net Q-dot = 24.44 kW
    
```

Figura 7.42. Resolución del ciclo en *Cyclepad*.

El trabajo neto para los datos de combustible del gasificador simulado en el caso II utilizando una relación de compresión 18:1, y una temperatura a la salida de la caldera de 1500 K es de 24,44 kW. Al fijar la temperatura cyclepad calcula el caudal másico de aire que necesita el ciclo, y este es de 0,0753 kg/s. El rendimiento del ciclo es de 41,68%.

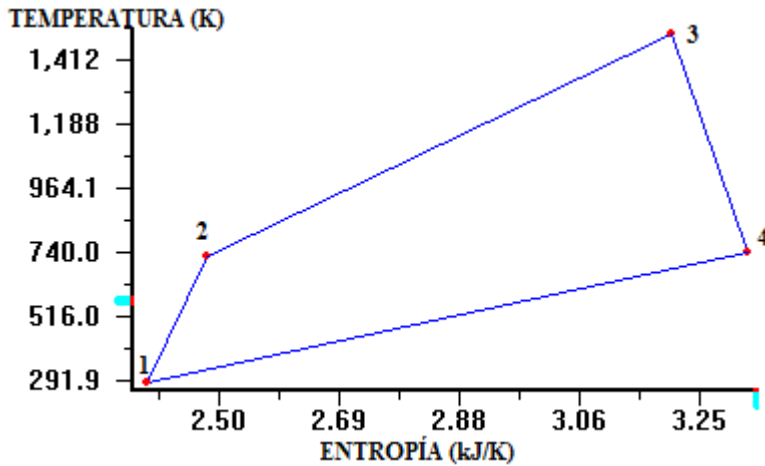


Figura 7.43. Diagrama T-S para el caso II

En el figura 7.43, se tiene un diagrama T-S del ciclo para las condiciones del caso II.

Con los datos del gasificador para el caso II tendríamos el siguiente rendimiento termodinámico.

$$\dot{W}_n = 24,44 \text{ kW}$$

$$\eta_{\text{ciclo}} = \frac{\dot{W}_n}{\dot{Q}_{\text{gas}}} = 41,68$$

Caso III

```

Modeled as: not HEAT-PUMP
Modeled as: not REFRIGERATOR
Modeled as: HEAT-ENGINE
eta-Carnot = 80.79%
eta-thermal = 41.68%
Tmax = 1,500 K
Tmin = 288.1 K
Pmax = 1,800 kPa
Pmin = 100.0 kPa
max-m-dot = UNKNOWN kg/s
Power in = -29.43 kW
Power out = 51.32 kW
net-power = 21.89 kW
back-work-ratio = 57.35%
work-ratio = 42.65%
Q-dot in = 52.52 kW
Q-dot out = -30.63 kW
net Q-dot = 21.89 kW
    
```

Figura 7.44. Resolución del ciclo en Cyclepad para el caso III.

El trabajo neto para los datos de combustible del gasificador simulado en el caso III utilizando una relación de compresión 18:1, y una temperatura a la salida de la caldera de 1500 K es de 24,44 kW. Al fijar la temperatura, Cyclepad proporciona el caudal de aire que utiliza el ciclo y es de 0,0674 kg/s. El rendimiento del ciclo es de 41,68%.

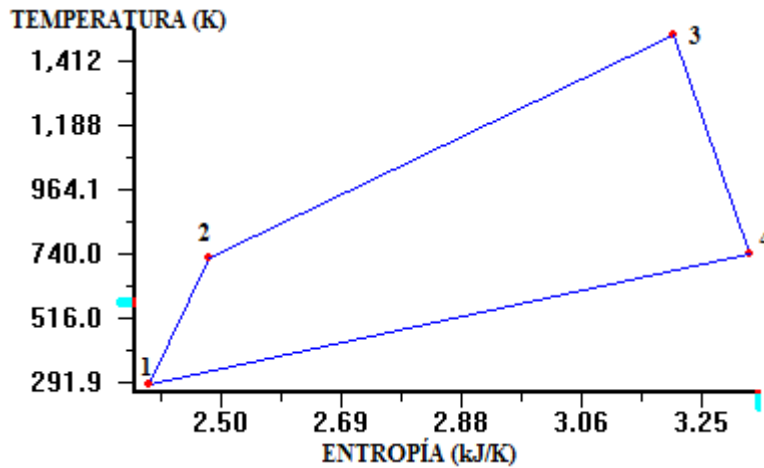


Figura 7.45. Diagrama T-S para el caso III

Con los datos del gasificador para el caso III tendríamos el siguiente rendimiento termodinámico:

$$\dot{W}_n = 21,89 \text{ kW}$$

$$\eta_{\text{ciclo}} = \frac{\dot{W}_n}{\dot{Q}_{\text{gas}}} = 41,68\%$$

El rendimiento termodinámico es el mismo para el caso II y el caso III, ya que solo depende de la relación de compresión. Mientras que el trabajo neto depende de la energía de gasificación, que es diferente en cada caso.

7.7.3. Rendimiento termodinámico de la planta

El rendimiento total termodinámico será igual al trabajo neto entre la potencia calorífica del carbón que se introduce en el gasificador.

$$\eta_{\text{termodinámico}}^{\text{planta}} = \frac{\dot{W}_n}{\dot{Q}_{\text{carbón}}} = \eta_{\text{gasificador}} \cdot \eta_{\text{ciclo}} \quad (7.5)$$

| Caso | $\eta_{total\ termodinámico}$ |
|------|-------------------------------|
| II | 0,133 |
| III | 0,12 |

Tabla 7.14. Rendimiento total termodinámico de la planta de potencia.

7.7.4. Rendimiento total

El rendimiento total tiene en cuenta las pérdidas que se dan en todo el proceso y viene dado por la siguiente fórmula:

$$\eta_{total} = \frac{\dot{W}_n \cdot \eta_e - \dot{W}_{molido} - \dot{W}_{aire} - \dot{W}_{subsistemas}}{\dot{Q}_{carbón}} \quad (7.6)$$

Donde

- \dot{W}_n , es el trabajo neto del ciclo.
- η_e , es el rendimiento eléctrico, se considerará 0,99.
- \dot{W}_{molido} , es el trabajo de moler el carbón, se considerará despreciable ya que un gasificador no necesita un molido intenso.
- \dot{W}_{aire} , es el trabajo de impulsar los gases y es igual a la variación de la presión por el caudal de gases ($\Delta P \cdot Q_{aire}$), se aproximará al 1% del \dot{W}_n .
- $\dot{W}_{subsistemas}$, son el resto de trabajos que hay que realizar para el correcto funcionamiento de la planta de potencia como iluminación, seguridad, etc, se puede considerar despreciable.
- $\dot{Q}_{carbón}$, es la potencia primaria del carbón (Poder calorífico inferior por gasto másico).

| Caso | η_{total} |
|------|----------------|
| II | 0,131 |
| III | 0,117 |

Tabla 7.15. Rendimiento total de la planta de potencia.

El rendimiento total obtenido es muy pequeño, debido a que el rendimiento del gasificador es bastante bajo como consecuencia del poco rendimiento de las reacciones heterogéneas en el gasificador. Sin embargo el gasificador puede evitar la emisión de contaminantes a la atmósfera como óxidos de azufre o de nitrógeno, que se hubiesen producido si el carbón se hubiese quemado directamente en una caldera convencional. Por otro lado la gasificación permite hacer funcionar una turbina de gas con carbón y utilizar la misma planta para gasificar otros combustibles como biomasa o residuos sólidos urbanos.

Resumen datos:

| | Caso II | Caso III |
|--------------------------------|---------|----------|
| $\dot{Q}_{gas}(kW)$ | 58,65 | 52,52 |
| $\dot{Q}_{carbón}(kW)$ | 182,7 | 182,7 |
| $\dot{W}_n(kW)$ | 24,44 | 21,89 |
| $\eta_{gasificador}$ | 0,32 | 0,287 |
| η_{ciclo} | 0,4168 | 0,4168 |
| $\eta_{termodinámico\ planta}$ | 0,133 | 0,12 |
| η_{total} | 0,131 | 0,117 |

Tabla 7.10. Resumen principales resultados del ciclo de potencia.

7.7.5. Ahorro de CO₂

7.7.5.1. Lecho de arena

También es interesante saber si se ahorran emisiones de CO₂.

Los kg de CO₂ que se emiten por cada kg de carbón varía en función del tipo de carbón pero se puede considerar de 2,53 kg CO₂/kg carbón [28].

El ahorro vendrá dado por la siguiente fórmula:

$$Ahorro\ CO_2 = \left(\frac{1}{\eta_{central\ térmica}} - \frac{1}{\eta_{total}} \right) \cdot \frac{\dot{W}_n \cdot 2,53\ kg_{CO_2}/kg_{carbón}}{PCI_{carbón}} \quad (7.7)$$

Siendo $\eta_{central\ térmica} = 0,361$, el rendimiento de una central térmica de carbón [29].

| CASO A ESTUDIO | Ahorro CO ₂ (kg/h) |
|----------------|-------------------------------|
| Caso II | -38,12 |
| Caso III | -40,55 |

Tabla 7.11. Ahorro de CO₂ en un lecho de arena.

No se ahorra CO₂, solo se consigue evitar emisiones de otros contaminantes como óxidos de azufre y de nitrógeno.

7.7.5.2. Lecho de arena con caliza

Estos cálculos demuestran que el ahorro de CO₂ de la planta es negativo si se utiliza arena inerte. Sin embargo el lecho fluido del gasificador puede contener partículas de caliza “CaO” capaces de secuestrar el CO₂ producido en las reacciones de gasificación mediante la siguiente fórmula:



Considerando el secuestro por absorción en caliza, se puede considerar un rendimiento de absorción de entre un 15%-70% , en función de la temperatura y el tiempo de residencia en el lecho [1].

Para un rendimiento de absorción de $\eta_{abs} = 0,15$, tendríamos:

$$Ahorro CO_2 = \left(\frac{1}{\eta_{central\ térmica}} - \frac{(1-\eta_{abs})}{\eta_{total}} \right) \cdot \frac{W \cdot n_{2,53} kg_{CO_2} / kg_{carbón}}{PCI_{carbón}} \quad (7.9)$$

| | |
|---|------------------------------------|
| <i>CASO A ESTUDIO</i> ($\eta_{abs} = 0,15$) | <i>Ahorro CO₂(kg/h)</i> |
| Caso II | -22,7 |
| Caso III | -31,55 |

Tabla 7.12. Ahorro CO₂ para un rendimiento de absorción ($\eta_{abs} = 0,15$)

No conseguiríamos ahorrar CO₂ para un $\eta_{abs} = 0,15$.

Para un rendimiento de absorción de $\eta_{abs} = 0,7$, tendríamos:

| | |
|--|------------------------------------|
| <i>CASO A ESTUDIO</i> ($\eta_{abs} = 0,7$) | <i>Ahorro CO₂(kg/h)</i> |
| Caso II | 3,762 |
| Caso III | 1,446 |

Tabla 7.13. Ahorro CO₂ para un rendimiento de absorción ($\eta_{abs} = 0,7$)

Por lo tanto si que se conseguiría ahorrar CO₂, para este rendimiento de absorción de $\eta_{abs} = 0,7$. Simplemente añadiendo algo de caliza al lecho se podrían evitar perjudiciales emisiones de CO₂, y disminuyendo con el ello el efecto invernadero en el planeta.

CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES

8.1. Resumen principales resultados

Se han estudiado las capacidades del software *Ansys Fluent* para simular la gasificación del carbón en lechos fluidos. Para ello se han simulado tres casos diferentes de reporte de carbón y gas de fluidización en un lecho reportado en la literatura.

8.1.1. Caso I

| Condiciones operación | Caso I |
|--|---------------|
| Temperatura de aire y de vapor a la entrada(K) | 695 |
| Temperatura entrada lateral (K) | 800 |
| Temperatura del reactor (K) | 1114 |
| Entrada inferior | |
| Velocidad entrada (m/s) | 0,342 |
| Fracción molar O_2 | 0,137 |
| Fracción molar H_2O | 0,275 |
| Fracción molar N_2 | 0,588 |
| Entrada lateral | |
| Velocidad entrada gases (m/s) | 0,318 |
| Velocidad entrada char (m/s) | 6.10^{-5} |
| Fracción molar CO_2 | 0,109 |
| Fracción molar H_2O | 0,054 |
| Fracción molar CH_4 | 0,522 |
| Fracción molar CO | 0,162 |
| Fracción molar H_2 | 0,153 |

Tabla 8.1. Datos utilizados para la simulación del casoI.

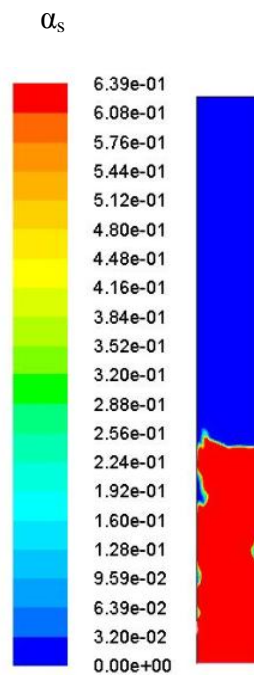


Figura8.1. Mapa de concentración de sólidos (caso I)

Al realizar la simulación del caso I, el lecho no llegó a burbujear permaneciendo en un estado de mínima fluidificación. Al activar las reacciones, fue la causa de que acabase divergiendo debido a que se alcanzaron temperaturas muy altas en determinados puntos del lecho, ya que el calor no se redistribuía de manera satisfactoria.

Las razones por las que el caso I no alcanzó un régimen de burbujeo completo pueden ser numerosas, es posible que el paso de una configuración 3-D a una configuración 2-D haya tenido una influencia mayor de lo que se pensaba en un principio y no haya favorecido la formación de burbujas. Es creíble pensar que una geometría tridimensional provoque más interferencia de los gases con las paredes del lecho, provocando una mayor concentración de gas en el centro del lecho que favorezca la formación de burbujas.

También es posible que en los artículos tomados de referencia (Wang et al,2009) y (Ocampo et al,2003) se haya utilizado algún parámetro adicional (no declarado) para definir las características del lecho y que haya tenido un peso significativo en los resultados.

8.1.2. Caso II y Caso III

Las condiciones para el caso II y caso III eran una vez hecho el ajuste a dos dimensiones:

| Condiciones operación | Caso II | Caso III |
|---|-------------------|-------------------|
| <i>Temperatura de aire y de vapor a la entrada(K)</i> | 693 | 641 |
| <i>Temperatura entrada lateral (K)</i> | 800 | 800 |
| <i>Temperatura del reactor (K)</i> | 1128 | 1099 |
| Entrada inferior | | |
| <i>Velocidad entrada (m/s)</i> | 0,3725 | 0,421 |
| <i>Fracción molar O₂</i> | 0,1413 | 0,15 |
| <i>Fracción molar H₂O</i> | 0,2512 | 0,20556 |
| <i>Fracción molar N₂</i> | 0,6075 | 0,6445 |
| Entrada lateral | | |
| <i>Velocidad entrada gases (m/s)</i> | 0,318 | 0,318 |
| <i>Velocidad entrada char (m/s)</i> | $6 \cdot 10^{-5}$ | $6 \cdot 10^{-5}$ |
| <i>Fracción molar CO₂</i> | 0,109 | 0,109 |
| <i>Fracción molar H₂O</i> | 0,054 | 0,054 |
| <i>Fracción molar CH₄</i> | 0,522 | 0,522 |
| <i>Fracción molar CO</i> | 0,162 | 0,162 |
| <i>Fracción molar H₂</i> | 0,153 | 0,153 |

Tabla 8.2. Datos utilizados para las simulaciones de los caso II y III.

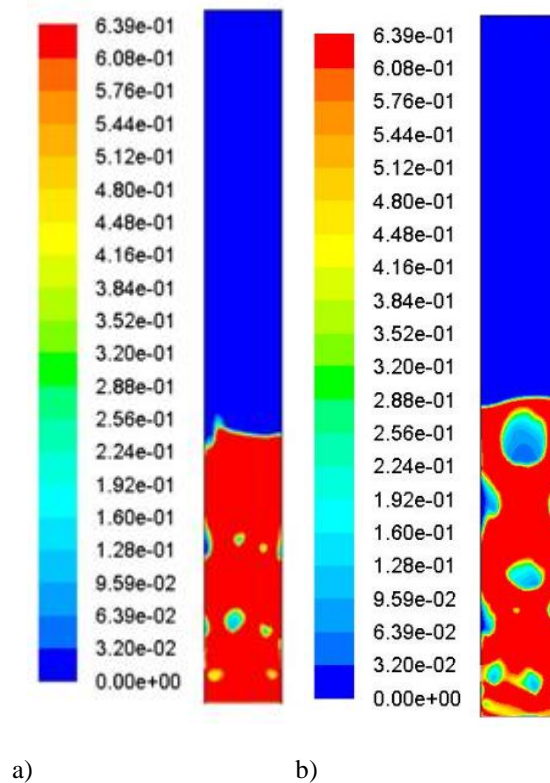


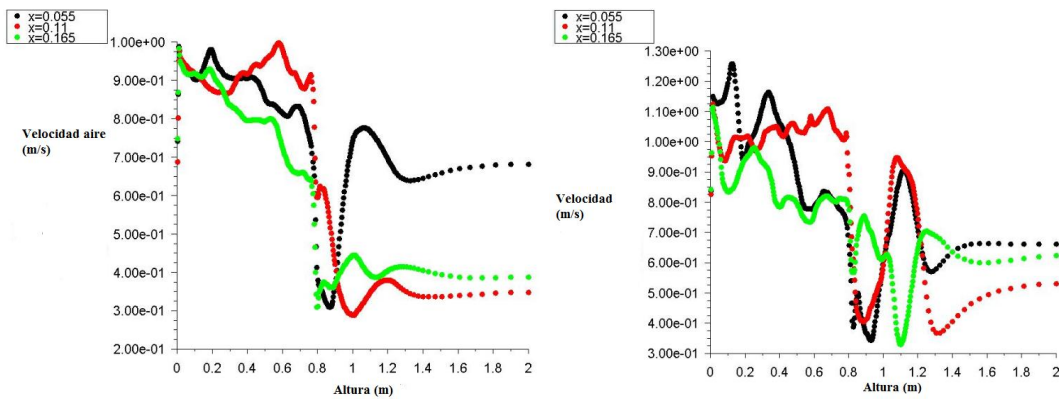
Figura 8.2. Mapas de la fracción volumétrica para el caso II a), y el caso III b).

A diferencia del caso anterior, en los casos II y III sí que existió burbujeo y se pudieron obtener datos de interés.

El comportamiento hidrodinámico del lecho en los caso II y III es el esperado, con formación de burbujas en la parte inferior del lecho que van creciendo mientras ascienden hasta que colapsan en la superficie. La cantidad de burbujas, su coalescencia y ruptura en la superficie es en el caso III es la más alta debido a que la velocidad superficial del gas de fluidización es mayor.

Tanto para el caso II como para el caso III (figura 8.3) el pico de velocidad es alcanzado a 0.6 m de altura, que coincide con la región de mayor crecimiento de las burbujas y decrece rápidamente hasta la superficie libre del lecho. Por encima de la superficie libre del lecho la velocidad aumenta ligeramente en el caso de los gases debido a que apenas hay sólidos que puedan ejercer cierta resistencia en la parte superior del lecho (figura 8.3).

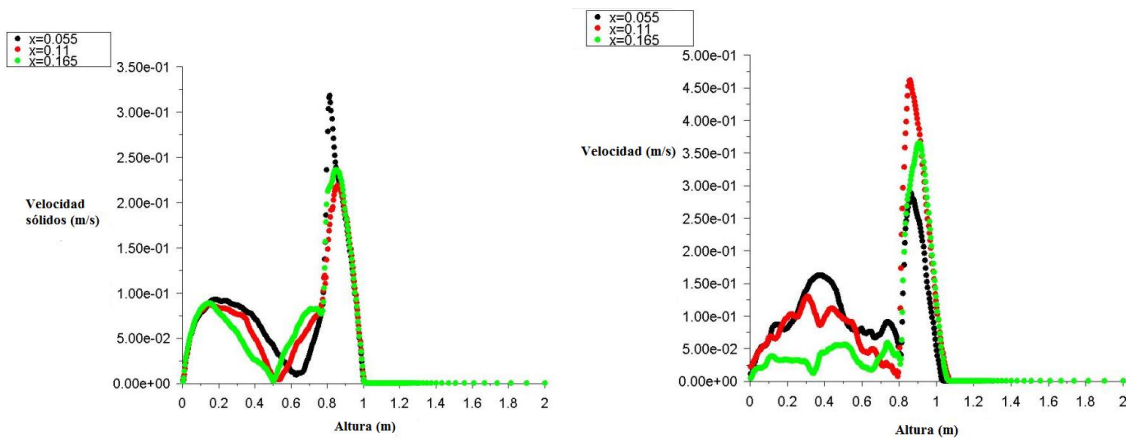
Para los sólidos la máxima velocidad se da en la superficie libre del lecho debido a la erupción de las burbujas, que provoca que las partículas sean lanzadas a gran velocidad, siendo mayor la velocidad que alcanzan los sólidos en el caso III que en el caso II ya que la velocidad de entrada de los gases por la parte inferior es mayor incorporando mayor energía cinética a las partículas del lecho. (figura 8.4)



a) Caso II

b) Caso III

Figura 8.3. Perfil del módulo de la velocidad de los gases a diferentes cortes.



a)

b)

Figura 8.4. Velocidad de los sólidos: a) Caso II y b) Caso III

Las concentraciones molares de las especies del combustible de gasificación (syngas) a la salida no son exactamente iguales a las reportadas en otros experimentos ya que las concentraciones de CO_2 , CO y H_2 son más reducidas de lo esperado. Observando los índices de reacción de las reacciones heterogéneas cuyos productos son precisamente estas sustancias se aprecia que dichos índices son bastante bajos en relación a los que se dan en las reacciones homogéneas. Se puede decir que el modelo está dominado por las reacciones homogéneas.

Por otro lado la mayor parte de las reacciones heterogéneas se concentran en las burbujas del lecho donde la concentración de carbón y gases es bastante alta y en la región libre del lecho, donde a pesar de que apenas hay sólidos, estos se vuelven más reactivos debido a que las temperaturas son mayores y aumenta la superficie de contacto con el aire.

El bajísimo nivel del CO probablemente se debe a que se produce en bajo grado mediante las reacciones heterogéneas y se consume principalmente mediante la reacción (R6): $\text{CO} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$. Además de que el equilibrio (R9): $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}_2$, tiende

a desplazarse hacia la derecha en la parte inferior del lecho por las relativamente bajas temperaturas y la alta concentración de agua.

La ligera mayor concentración de metano registrada respecto a los experimentos utilizados para la comparación de los resultados puede explicarse a que la temperatura del lecho es relativamente baja en la parte inferior del lecho debido a la baja eficiencia de las reacciones heterogéneas, lo cual disminuye el consumo del mismo. En la parte superior del lecho las temperaturas son más altas pero la concentración de oxígeno disminuye, suavizando con ello el consumo de metano provocado mediante la reacción (R8): $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$.

Se puede decir que el comportamiento de las especies del lecho es bastante estable con el paso del tiempo y no existen grandes variaciones de la concentración de estos entre un instante y otro como se puede comprobar con los diagramas RMS, principalmente en las regiones superiores del lecho. Esto aseguraría un régimen relativamente continuo de suministro de combustible de gasificación (syngas) hacia otros elementos de la instalación como por ejemplo una turbina de gas.

| Fracción másica | Valores medios | Desviación típica |
|---|-------------------|----------------------|
| O ₂ | 0,1613 | $2,25 \cdot 10^{-3}$ |
| CO ₂ | 0,033 | $5 \cdot 10^{-3}$ |
| H ₂ | 0,00155 | $2,5 \cdot 10^{-4}$ |
| H ₂ O | 0,1615 | $2,5 \cdot 10^{-3}$ |
| CH ₄ | 0,0256 | $3 \cdot 10^{-3}$ |
| N ₂ | 0,615 | $7 \cdot 10^{-3}$ |
| CO | $2 \cdot 10^{-3}$ | $1 \cdot 10^{-3}$ |
| Temperatura(k) | 968 | 18 |
| Caudal másico a la salida del gasificador (kg/s) | 0,04 | 0,004 |

Tabla 8.3. Resultados más importantes a la salida del gasificador para el caso II.

| Fracción másica | Valor medio | Desviación típica |
|---|-------------|---------------------|
| O ₂ | 0.169 | $5 \cdot 10^{-5}$ |
| CO ₂ | 0.026 | $6 \cdot 10^{-6}$ |
| H ₂ | 0.0012 | $3 \cdot 10^{-7}$ |
| H ₂ O | 0.144 | $3 \cdot 10^{-5}$ |
| CH ₄ | 0.019 | $4 \cdot 10^{-6}$ |
| N ₂ | 0.64 | $1,5 \cdot 10^{-4}$ |
| CO | 0.001 | $2 \cdot 10^{-7}$ |
| Temperatura(k) | 915 | 0,3 |
| Caudal másico a la salida del gasificador (kg/s) | 0.048 | 0,002 |

Tabla 8.4. Resultados más importantes a la salida del gasificador para el caso III.

8.1.3. Integración con el ciclo de potencia

Los gases generados en el gasificador (syngas) se han quemado en una caldera para producir potencia mediante una turbina de gas basada en un ciclo brayton.

El ciclo se va a simular en el presente proyecto es el siguiente:

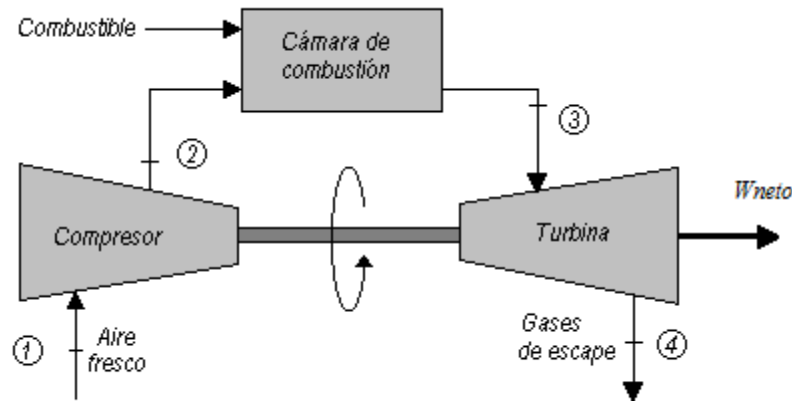


Figura 8.5. Esquema del ciclo

Que consta de los siguientes procesos:

- Compresión en un compresor.
- Combustión de los gases procedentes del gasificador en una cámara de combustión.
- Expansión de los gases en una turbina.

Al integrar con el ciclo de potencia se han obtenido los siguientes resultados:

| | Caso II | Caso III |
|--------------------------------|---------|----------|
| $\dot{Q}_{gas}(kW)$ | 58,65 | 52,52 |
| $\dot{Q}_{carbón}(kW)$ | 182,7 | 182,7 |
| $\dot{W}_n(kW)$ | 24,44 | 21,89 |
| $\eta_{gasificador}$ | 0,32 | 0,287 |
| η_{ciclo} | 0,4168 | 0,4168 |
| $\eta_{termodinámico\ planta}$ | 0,133 | 0,12 |
| η_{total} | 0,131 | 0,117 |

Tabla 8.5. Resultados más importantes de la integración con el ciclo de potencia.

Los rendimientos obtenidos son muy bajos comparados por ejemplo con una central térmica convencional ($\eta_{central\ térmica} \sim 0,36-0,38$). Sin embargo el objetivo no es obtener un gran rendimiento, sino comprobar que es factible realizar simulaciones de lo que ocurre dentro de un lecho mediante simulaciones hechas por ordenador y su posterior conexión a una turbina de gas para así crear una planta autónoma.

Además, este tipo de gasificadores podría estar enfocado a quemar carbones de muy mala calidad que tengan muchos contaminantes y que de otra forma no se aprovecharían. Esto es así debido a que sus bajas temperaturas relativas disminuyen la producción de óxidos de nitrógeno nocivos para la salud y el posible uso de caliza junto a la arena del lecho absorbe el azufre, impidiendo la formación de lluvia ácida y reduciendo considerablemente la formación de CO_2 que provoca el calentamiento del planeta mediante efecto invernadero.

Tanto el sistema de gasificador como la turbina de gas son equipos relativamente compactos que permitirían ser utilizados como plantas de reducida potencia en regiones en desarrollo o aisladas con baja disponibilidad de energía.

8.2. Crítica de los resultados

Los resultados de la simulación desarrollada en el presente proyecto reflejan correctamente el comportamiento hidrodinámico del lecho, salvo en el caso I a estudio que se encuentra en un estado de mínima fluidificación cuando debía estar burbujeando según otros estudios reportados en la literatura. El que en el presente proyecto no se haya logrado un régimen de burbujeo en el caso I posiblemente tenga que ver con la geometría del lecho o con algún parámetro que en la simulación 3-D de otros autores no se ha dejado constancia.

Las reacciones heterogéneas del gasificador a estudio no son todo lo eficientes que se esperaban y eso quizá ha provocado la baja formación de algunas especies como CO_2 , CO y H_2 .

Habría que mejorar el modelo de reacción heterogénea utilizado para que se ajustase mejor a la realidad, aunque hay que indicar que no existía ningún programa similar para tomarlo como referencia y la ayuda proporcionada por el propio programa era prácticamente inexistente. A eso hay que añadir que los artículos y referencias consultadas no reflejan muchos parámetros necesarios para poder simular el lecho.

Sin embargo las reacciones homogéneas si parecen funcionar correctamente y la temperatura se corresponde con lo esperado. De forma los resultados de la simulación indican que en el lecho fluido no se alcanzan grandes valores que pudiesen favorecer la formación de óxidos de nitrógeno u de otros contaminantes.

Aunque la variación de los valores de la concentración de las especies no es muy alta, especialmente en la salida del simulador sería aconsejable compararlos con resultados experimentales o con otras simulaciones para conocer su representatividad.

Los rendimientos obtenidos mediante la integración con el ciclo de potencia son bastante bajos en comparación con plantas convencionales de carbón. No obstante, para carbones de baja calidad con alto contenido en azufre u otros contaminantes como el que existe en España puede ser una opción interesante el uso de la gasificación. Además la incorporación en el lecho de caliza puede ayudar a la reducción del CO_2 quemado.

8.3. Presupuesto proyecto

La estimación del presupuesto de este proyecto tiene en cuenta los costes del personal que han participado en su realización y del hardware y del software utilizado. La duración total del proyecto ha sido de 2 años.

8.3.1 Costes de personal

En el proyecto han participado dos ingenieros, de los cuales uno era junior (el autor del proyecto) y el otro senior (el director del proyecto).

El ingeniero junior ha trabajado 2500 horas y su salario estimado es de 25 €/h.

El ingeniero senior ha trabajado 100 horas y su salario estimado es de 40 €/h.

| Concepto | sueldo/hora(€/h) | horas | total |
|------------------|------------------|-------|-------|
| Ingeniero Junior | 25 | 2500 | 62500 |
| Ingeniero Senior | 40 | 100 | 4000 |

Tabla 8.6. Costes de personal en el proyecto a estudio.

Total salarios: 66500 €

8.3.2. Costes hardware

En este apartado se incluye el ordenador utilizado para realizar las simulaciones.

| Concepto | Precio(€) |
|-------------------------|-----------|
| Ordenador ASPIRE 5740 G | 599 |

Tabla 8.7. Costes de hardware.

Total hardware: 599 €

8.3.3. Costes Software

En este apartado se incluyen los programas que se han utilizado para la realización del proyecto.

| Concepto | Precio(€) |
|----------------------|-------------------------------------|
| Plataforma Windows 7 | Incluido en el precio del ordenador |
| Plataforma Office | 99 |
| Visual Basic studio | 499 |
| Gambit | 670 |
| Ansys Fluent | 2000 |

Tabla 8.8. Costes de software

Total Software: 3268 €

8.3.4. Presupuesto total

Se ha incluido un 10% de margen de otros costes (local, luz, limpieza, material de oficina, etc.) sobre el coste estimado del proyecto.

| Concepto | Precio(€) |
|--------------------|-----------|
| Costes de personal | 66500 |
| Costes de hardware | 599 |
| Costes de software | 3268 |
| Total Costes | 70367 |
| Margen (10%) | 7036,7 |

Tabla 8.9 Resumen costes del proyecto.

Total proyecto: 77.403,7 €

8.4. Líneas futuras de trabajo

La gasificación del carbón y la utilización del syngas producido en ciclos de potencia tiene un gran potencial y posiblemente su uso aumente a medida que las necesidades energéticas en la sociedad sean mayores.

-El estudio se ha realizado en un gasificador que trabaja a presión atmosférica y líneas futuras de investigación deberían ir enfocadas a gasificadores que trabajen a alta presión, (por ejemplo 20 atm) ya que estos tienen rendimientos mayores.

-También se podría aprovechar la temperatura de los gases a la salida de la turbina para producir energía mediante un ciclo rankine (ciclo combinado turbina de gas-ciclo de vapor) aumentando la eficiencia total del ciclo.

- Habría que mejorar el modelo utilizado para las reacciones heterogéneas, ya que estas se han comportado de forma poco eficiente. A este respecto, una de las mejoras podría consistir en considerar una liberalización progresiva de los volátiles del carbón en lugar de una liberalización instantánea.

-En futuros desarrollos de la simulación puede abordarse el estudio del purgado progresivo del lecho para eliminar cenizas y su sustitución por material de arena fresco.

-También un estudio más avanzado de la gasificación podría incluir la simulación de absorción de CO₂ en el lecho por parte de partículas de caliza.

- La combustión con syngas a veces produce problemas de apagado de llama. Esto es debido a que la composición de la mezcla que entra a la cámara de combustión puede variar con el tiempo desestabilizando la llama. Habría que investigar formas para conseguir que la llama sea lo más estable posible, como por ejemplo usando cámaras de combustión de gran tamaño para evitar al máximo la turbulencia dentro de ellas.

-El coeficiente de tridimensionalidad ψ utilizado es quizá uno de los parámetros más importantes a validar si se desea comparar lo más fidedignamente posible los resultados 2-D con los procedentes de simulaciones 3-D.

Bibliografía

Libros y artículos

- [1] Prabir basu, Combustion and gasification in fluidized bed (2006) by Taylor & Francis Group, LLC
- [2] D. Kunii, O. Levenspiel, Fluidization Engineering, 2nd Edition, Butterworth-Heinemann (1991)
- [3] M. Rhodes, Introduction to Particle Technology, John Wiley & Sons (1998)
- [4] Wang et al, Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification, Chemical Engineering and Processing 48 (2009) 695–705 (2009)
- [5] Yiqun Wang, Lifeng Yan, CFD based combustion model for sewage sludge gasification in a fluidized bed, Chem. Eng. China 2009, 3(2): 138–145
- [6] F.C.Brown, H.G. Hargreaves, Coal gasification-routes to ammonia and methanol (1978) International Fertiliser Society PO Box 4 York YO32 5YS. United Kingdom
- [7] A. Ocampo et al, An experimental study on gasification of Colombian coal in fluidized bed. Fuel 82 (2003) 161–164
- [8] Dale M. Snider et al, Eulerian–Lagrangian method for three-dimensional thermal reacting flow with application to coal gasifiers (2011) Chemical Engineering Science 66 (2011) 1285–1295.
- [9] Q. Xue, T.J. Heindel, R.O. Fox, A CFD model for biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors. Chemical Engineering Science 66 (2011) 2440–2452.
- [10] Liang Yu et al, Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF), Fuel 86 (2007) 722–734.
- [11] Dimitrios Sofialidis and Ourania Faltsi, Simulation of biomass gasification in fluidized beds using computational fluid dynamics approach. THERMAL SCIENCE: vol.5, (2001), No 2, pp 95-105
- [12] Fluent Inc. (1998). FLUENT5 User's Guide, Fluent Inc., Lebanon NH, U.S.A.
- [13] Lu HL, He YR, Gidaspow D. Hydrodynamic modeling of binary mixture in a gas bubbling fluidized bed using the kinetic theory of granular flow. Chem. Eng. Sci 2003; 58:1197-205.
- [14] C. K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, and N. Chepurniy. Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field. *J. Fluid Mech.*, 140:223-256, 1984.

- [15] Libro verde. Hacia una estrategia europea de abastecimiento energético. Bruselas, 29.11.2000. COM(2000) 769 final.
- [16] D. G.Schaeffer. Instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow. *J. Diff. Eq.*, 66:19-50, 1987
- [17] Ergun, S., Fluid flow through packed columns, Chem. Eng. Prog., 48,89-94,1952.
- [18] Grace, J.R., Fluidized bed hydrodynamics, In Handbook of Multiphase Systems, Hestroni, G., Ed.,Hemisphere, Washington, DC, chap. 8.1,1982.
- [19] Geldart, D., Gas fluidization technology, Wiley, Chichester, p. 88, 1986.
- [20] Howard, J. R., Fluidized bed technology-Principles and applications, Adam Higer, Bristol, UK,1989.
- [21] Li, Xuantian, Grace, J.R., Lim, C.J., Watkinson, A.P., Chen, H.P., and Kim, J.R., Biomass gasification in a circulating fluidized bed, Biomass Bioenergy, 26, 171-193,2004.
- [22] Li, Xuantian, Personal Communication, May, 2005.
- [23] Quader, S. A., Natural gas substitutes from coal and oil, Coal Sci. Technol., vol. 8, 1985.

Páginas web

- [24] Departamento de energía del gobierno de Estados Unidos
<http://www.fossil.energy.gov/programs/powersystems/gasification/>, Marzo 2012
- [25] Página de google
<http://www.google.es>
- [26] Página de Michigan engineering
<http://www.engin.umich.edu>, Abril 2012
- [27] Página de la Universidad de Northwestern
<http://www.qrg.northwestern.edu/projects/NSF/cyclepad/cyclepad.htm>
- [28] Oficina catalana del cambio climático
www.gencat.cat/canviclimatic
- [29] Instituto para la diversificación y ahorro de energía
www.idae.es

Simulación numérica de la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante mediante un modelo Euleriano-Euleriano de dos fluidos.